

Jülich Supercomputing Centre (JSC)

# Untersuchungen zum Fehlerverhalten der Ewald-Summation für hydrodynamische Wechselwirkungen

*Lidia Westphal*





# **Untersuchungen zum Fehlerverhalten der Ewald-Summation für hydrodynamische Wechselwirkungen**

*Lidia Westphal*

Berichte des Forschungszentrums Jülich; 4306  
ISSN 0944-2952  
Jülich Supercomputing Centre (JSC))  
Jül-4306

Vollständig frei verfügbar im Internet auf dem Jülicher Open Access Server (JUWEL) unter  
<http://www.fz-juelich.de/zb/juwel>

Zu beziehen durch: Forschungszentrum Jülich GmbH · Zentralbibliothek, Verlag  
D-52425 Jülich · Bundesrepublik Deutschland  
☎ 02461 61-5220 · Telefax: 02461 61-6103 · e-mail: [zb-publikation@fz-juelich.de](mailto:zb-publikation@fz-juelich.de)

## **Zusammenfassung**

Die Ewald-Summation ist ein Verfahren aus dem Bereich der molekular-dynamischen Simulationen, das große Popularität bei der Behandlung elektrostatischer Probleme unter periodischen Randbedingungen gewonnen hat. Dabei werden die langreichweitigen Wechselwirkungen über zwei unendliche Summen ermittelt, wobei in einer der Summen die Nah- und in der anderen die Fernfeld-Berechnungen stattfinden. Da es allein rechnerisch nicht möglich ist, unendlich viele Berechnungen durchzuführen, müssen die Summen in einer Simulation begrenzt ausgewertet werden. Dadurch entsteht ein Approximationsfehler, der von der Größe der Abschneideparameter abhängt.

In dieser Arbeit wurde das Fehler-Verhalten der Ewald-Summation für hydrodynamische Wechselwirkungen in Abhängigkeit von den Abschneideparametern untersucht, und die hergeleiteten Ergebnisse wurden in einer Brownian-Dynamics-Simulation verifiziert. Weil für eine Computersimulation nicht nur die Güte der Approximationslösung, sondern auch die Laufzeit für die Wahl einer Methode entscheidend ist, wurde die optimale Einstellung der relevanten Parameter nicht nur im Hinblick auf die vorgegebene Fehlerschranke, sondern auch auf die minimale Laufzeit für unterschiedliche Systemgrößen ermittelt.

## **Abstract**

The Ewald summation is a well-known method, especially in electrostatics, for calculating long-range interactions between particles in systems with periodic boundary conditions. These calculations utilize two rapidly converging infinite sums, representing the short- and long-range interactions. The obvious inability of a computer simulation to handle an infinite number of summands leads to an error that depends on the cutoff parameters used.

The focus of this thesis was the estimation of the approximation error as a function of the cutoff-parameters of both sums. These results were verified in a Brownian dynamics simulation. In addition to accuracy, the computation time of a simulation is a crucial factor. Therefore estimates of the influence of relevant parameters and system size on the run time were made in order to gain accurate results within the shortest possible time.



## **Danksagung**

An dieser Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei meinem Betreuer Dr. Godehard Sutmänn für die Möglichkeit der Erstellung dieser Arbeit, seinen bemerkenswert engagierten Einsatz und eine sehr schöne und motivierende Arbeitsatmosphäre bedanken. Mein Dank gilt auch Prof. Dr. Martin Reißel für die erstaunliche Gründlichkeit beim Lesen der Arbeit und seinen unerschütterlichen Optimismus bzgl. der Einhaltung der Abgabefristen.

Ganz großer Dank gilt meinen Eltern und meinen Schwiegereltern, bei denen sich meine kleine Tochter jederzeit verwöhnen lassen konnte, wenn meinerseits Bedarf danach bestand. Und ganz besonders möchte ich meinen Eltern für ihre grenzenlose Unterstützung und meinem Mann für sein Verständnis, seine Geduld, Zuversicht und Hilfsbereitschaft danken, die ich ununterbrochen erfahren habe.





# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen</b>	<b>3</b>
2.1	Hydrodynamik . . . . .	3
2.1.1	Navier-Stokes-Gleichungen . . . . .	3
2.2	Computersimulationen von hydrodynamischen Prozessen . . . . .	4
2.2.1	Der Oseen-Tensor . . . . .	5
2.2.2	Der Rotne-Prager-Tensor . . . . .	7
2.2.3	Langreichweitige Wechselwirkungen . . . . .	7
2.2.4	Periodische Randbedingungen . . . . .	8
2.2.5	Ewald-Summation . . . . .	9
2.2.6	Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Fehlerabschätzung</b>	<b>15</b>
3.1	Allgemeine Fehlerberechnung der Nahfeld-Summe . . . . .	16
3.1.1	Bestimmung der Extremstellen . . . . .	19
3.1.2	Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe . . . . .	23
3.2	Allgemeine Fehlerberechnung der Fernfeld-Summe . . . . .	30
3.2.1	Bestimmung der Extremstellen . . . . .	32
3.2.2	Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe . . . . .	34
3.3	Fehlerberechnung für Oseen-Tensor . . . . .	38
3.3.1	Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe . . . . .	39
3.3.2	Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Parameteranalyse</b>	<b>45</b>
4.1	Fehlerverhalten in Abhängigkeit von Parametern . . . . .	45
4.2	Laufzeitabschätzung . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Simulation</b>	<b>55</b>
5.1	Brownian-Dynamics-Methode . . . . .	55
5.1.1	Gradient des Rotne-Prager-Tensors in der Ewald-Summation . . . . .	56
5.2	Verifizierung der Fehlerabschätzung . . . . .	57
5.2.1	Fehlerstabilität . . . . .	61
5.3	Verifizierung der Laufzeitabschätzung . . . . .	61
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>65</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>69</b>



# Abbildungsverzeichnis

2.1	NaCl-Struktur . . . . .	9
2.2	Periodische Randbedingungen . . . . .	9
2.3	Cutoff-Radius . . . . .	10
2.4	Verschmierung der Punktladungen bei der Ewald-Summation . . . . .	11
3.1	Fehlerabschätzungs-Funktionen . . . . .	18
3.2	Funktion $T_1(r)$ nur mit $a$ -Termen bei unterschiedlichen Parametern . . . .	21
3.3	Funktion $T_2(r)$ nur mit $a$ -Termen bei unterschiedlichen Parametern . . . .	22
3.4	Die Funktion $T_3(k)$ und ihre Approximationen für unterschiedliche Teilchen- Radien beim $\xi = 5.5$ . . . . .	33
4.1	Fehlerfunktionen $\varepsilon_{nah}(R_c)$ und $\varepsilon_{fern}(K_{max})$ für unterschiedliche $\xi$ -Werte für $N = 1000$ . . . . .	46
4.2	Abhängigkeit der Parameter $R_c$ und $K_{max}$ von den $\xi$ -Werten . . . . .	47
4.3	Anzahl der zu berücksichtigenden Boxen in Abhängigkeit vom Cutoff- Radius . . . . .	50
4.4	Laufzeitabschätzung in Abhängigkeit von $\xi$ . . . . .	52
4.5	Abschätzung für die gesamte Laufzeit in Abhängigkeit von $\xi$ für unter- schiedliche Fehlerschranken und Teilchenanzahlen . . . . .	53
5.1	Fehlerverifizierung anhand der 1-Norm . . . . .	59
5.2	Fehlerverifizierung anhand der 2-Norm . . . . .	60
5.3	Fehlerverhalten in einer Simulation . . . . .	61
5.4	Messergebnis für die Nahfeld- und Fernfeld-Laufzeit bei $N = 1000$ für un- terschiedliche Fehlerschranken . . . . .	62
5.5	Messergebnisse für die Gesamtlaufzeit für 125 und 1000 Teilchen . . . . .	63



# 1 Einleitung

Die Gesetze der Hydrodynamik, oder auch Fluidodynamik genannt, erlauben eine Beschreibung strömender Flüssigkeiten, Gase, Gasgemische, Rauch und sogar Plasmen [5]. In Forschung und industrieller Entwicklung sind auf Ihnen basierende Anwendungen und Modelle praktisch allgegenwärtig: in der Hydrologie und Ozeanographie lassen sich die Strömungen von Gewässern unterschiedlichster Größenordnungen untersuchen. Auch die Strömung von Luftmassen kann in den unterschiedlichsten Bereichen von der Meteorologie bis zur Berechnung des Luftwiderstandes von Fahr- und Flugzeugen simuliert werden. Aber auch die Entwicklung neuer Stoffe, das Verhalten chemischer Reaktionen und Wechselwirkungen von Proteinen in Lösungen werden mit Hilfe hydrodynamischer Gesetze modelliert.

Da es für viele Problemstellungen zu kostenintensiv bzw. kaum möglich ist, die hydrodynamischen Vorgänge experimentell zu untersuchen, werden sie häufig als mathematische Modelle formuliert und am Computer simuliert. Es gibt unterschiedliche Betrachtungsweisen, die für die Computersimulation der hydrodynamischen Wechselwirkungen entscheidend sind und auch von der Problemstellung abhängen. Mit Hilfe der Hydrodynamik kann man einerseits globale Prozesse wie die Ausbreitung von Schadstoffen in Gewässern oder Strömungsverhalten von Wasser in Kanalröhren simulieren, andererseits aber auch Wechselwirkungen von Partikeln, die in einem Medium suspendiert sind. Es ist naheliegend, dass man bei so unterschiedlichen Anwendungsbereichen auch unterschiedliche Modelle zugrunde legt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Verhalten einer speziellen Methode aus dem Gebiet der Molekulardynamik, die Verfahren für die Simulation von Systemen mit einer Vielzahl von Partikeln beschreibt, untersucht. Es handelt sich um die Ewald-Summation, die ursprünglich für die schnelle Berechnung langreichweitiger Wechselwirkungen in der Elektrostatik entwickelt wurde. Da die Wechselwirkungen in der Hydrodynamik auch langreichweitig - und dadurch rechenintensiv - sind, wäre die Ewald-Summation eine geeignete Methode, um den Rechenaufwand zu reduzieren.

Eine der Problemstellungen, die man mit Hilfe der Ewald-Summation untersuchen kann, ist folgende: Man stelle sich vor, man habe eine Suspension aus  $N$  Teilchen und einem Lösungsmedium. Unter dem Einfluss der Kräfte, die auf die Teilchen einwirken, sei es Gravitation oder Brownsche Molekularbewegung, bewegen sich die Teilchen und verändern damit lokal die Geschwindigkeit des umgebenden Mediums. Diese Veränderungen breiten sich aus und beeinflussen wiederum die Bewegung und dadurch auch die Kräfte der restlichen Teilchen, die sich im System befinden. Alle Systemkomponenten wechselwirken miteinander.

Diese Wechselwirkung wird über die Gesetze der Hydrodynamik beschrieben. Da es sich in diesem Beispiel um ein Vielteilchen-System handelt und hydrodynamische Wechselwirkungen langreichweitig sind, müssen die Kraftbeiträge aller Teilchen berücksichtigt werden. Dies geschieht über die Summation der Wechselwirkungen aller Teilchen, wo-

bei diese Summe nur bedingt konvergent ist. Durch den Ewald-Ansatz wird das Konvergenzverhalten dieser Summe insofern verändert, als dass man absolute Konvergenz erhält, die noch dazu viel schneller eintritt.

Ein anderes Problem bei der Simulation von Vielteilchen-Systemen mit langreichweitigen Wechselwirkungen ist, dass man theoretisch ein unendlich großes System betrachten muss, um die exakte Lösung des Problems zu erhalten. Da dies aber für eine Computersimulation allein schon rechentechnisch nicht möglich ist, betrachtet man nur einen kleinen System-Ausschnitt und zieht aufgrund der Ergebnisse Schlussfolgerungen auf das gesamte Problem. Dabei muss man darauf achten, dass die Ränder geeignet beschrieben werden, sodass keine Verzerrungen der physikalischen Größen entstehen. Da die Ewald-Summation periodische Randbedingungen voraussetzt und diese auch gut geeignet sind, um langreichweitige Wechselwirkungen zu untersuchen, wurden sie in dieser Arbeit für die Systembeschreibung verwendet. Über periodische Randbedingungen lässt sich ein unendlich großes System modellieren, sodass der Einfluss der Wechselwirkungen einzelner Teilchen über große Entfernungen berücksichtigt werden kann. Allerdings erhält man immer noch keine genaue Lösung, weil diese Entfernungen beschränkt werden müssen. Durch die Einführung einer maximalen Entfernung, im deren Radius die Wechselwirkungen betrachtet werden, entsteht ein Approximationsfehler, dessen Untersuchung das Ziel dieser Arbeit war.

Zuerst wurde die Fehlerfunktion abhängig von Abschneideparameter analytisch ermittelt und das Ergebnis im Hinblick auf die Laufzeit und Konvergenz grafisch analysiert, danach wurde die Ewald-Summation implementiert und in eine Brownian-Dynamics-Simulation eingebunden, um ihr Fehler- und Laufzeitverhalten in der Simulation zu verifizieren.

---

## 2 Grundlagen

### 2.1 Hydrodynamik

Wie schon bereits erwähnt, beschreibt die Hydrodynamik die Physik der Flüssigkeiten und Gase, die durch das Fluidmodell dargestellt wird. Ein Fluid kann als Kontinuum beschrieben werden, dessen Haupteigenschaft ist, dass es im Ruhezustand an der Oberfläche nur Druckkräfte aufnehmen kann [12]. Ein Kontinuum kann in immer kleinere Volumenbereiche unterteilt werden, ohne dass dadurch die physikalischen Eigenschaften verloren gehen, und ist damit also eine Idealisierung eines materiellen Körpers. Schon sehr kleine Kräfte, die auf ein Fluid einwirken, führen zur Verschiebung seiner Elemente. Das Verschieben der Fluidelemente gegeneinander hängt im wesentlichen von den Druckkräften und der Viskosität ab, die die innere Reibung eines Fluids beschreibt. Abhängig von der Art des Reibungsverhaltens unterscheiden sich die Fluide in Newtonsche und nicht-Newtonsche. Als Beispiel für die Newtonschen Fluide können Wasser, Luft und viele Öle aufgeführt werden, das nicht-Newtonsche Verhalten zeigen Blut, Glycerin und z.B. Zementleime. In dieser Arbeit wurden speziell Newtonsche Flüssigkeiten betrachtet, die dazu noch inkompressibel sind, deren Dichte also unabhängig vom Druck ist. Die Bewegungen der Newtonschen Flüssigkeiten werden durch Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben.

#### 2.1.1 Navier-Stokes-Gleichungen

Die Navier-Stokes-Gleichungen sind die Grundgleichungen der Strömungsmechanik. Sie existieren sowohl für kompressible als auch inkompressible Flüssigkeiten und werden aus drei physikalischen Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie abgeleitet. Es handelt sich um ein System von nichtlinearen partiellen Differentialgleichungen zweiter Ordnung. Im folgenden werden die Navier-Stokes-Gleichungen für eine inkompressible Newtonsche Flüssigkeit in einem durch  $\Gamma$  begrenzten Volumen im  $\mathbb{R}^3$  betrachtet, so dass Dichte, Viskosität und Temperatur konstant und Druck und Geschwindigkeit variabel sind [7].

Gesucht sind also die Flüssigkeits-Geschwindigkeit und der Druck  $(u, p)$ , so dass

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla) v - \eta \Delta v + \nabla p &= f \quad \text{in } \Omega \times I, \\ \nabla \cdot v &= 0 \quad \text{in } \Omega \times I, \\ v &= w \quad \text{auf } \Gamma \times I, \\ v(\cdot, 0) &= v^0 \quad \text{in } \Omega \end{aligned} \tag{2.1}$$



mit Geschwindigkeit  $v = (v_1, v_2, v_3)$  und Flüssigkeitsdruck  $p$ , wobei  $f, w, v^0$  und  $I = (0, T)$  die vorgegebene antreibende Kraft, Randwerte, Anfangsdaten und das Zeitintervall sind. Die erste Gleichung in (2.1) ist die Newtonsche Impulsgleichung  $f = ma$ , wobei der Term  $\frac{\partial v}{\partial t} + (v \cdot \nabla) v$  der Beschleunigung eines Flüssigkeitsteilchens entspricht. Die zweite Gleichung stellt die Inkompressibilitätsbedingung dar.

Weil die Navier-Stokes-Gleichungen nichtlinear sind, sind sie mathematisch nur sehr schwer zu lösen. Es gibt einzelne Problemstellungen mit einfachem Strömungsverlauf, für die die exakten Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen bekannt sind. Im allgemeinen benutzt man aber für ihre Lösungen Näherungsverfahren.

Eine große Klasse der Näherungsverfahren basiert auf der Linearisierung der Gleichungen. Ob diese Klasse für eine gegebene Problemstellung geeignet ist, hängt von den Reynolds-Zahlen der zu untersuchenden Flüssigkeit ab. Die Reynolds-Zahl ist eine dimensionslose Größe und gibt das Verhältnis zwischen der Flüssigkeits-Geschwindigkeit und der Viskosität an. Große Reynolds-Zahlen, also hohe Flüssigkeits-Geschwindigkeit bei gleichzeitig geringer Viskosität, bedeuten, dass die Strömung sehr sensibel auf kleinste Störungen reagiert, was zu einem sehr komplexen Verhalten und Turbulenzen führen kann. Kleine Reynolds-Zahlen sind dagegen Eigenschaften laminarer Strömungen, also von Strömungen ohne Turbulenzen.

Bei der Linearisierung der Gleichungen wird die Beschleunigung und damit der nichtlinearer Term  $(v \cdot \nabla) v$  vernachlässigt. Dies ist jedoch nur dann sinnvoll, wenn die Flüssigkeits-Geschwindigkeit ausreichend langsam ist. Damit ist diese Methode aber nur für kleine Reynolds-Zahlen ( $Re \ll 1$ ) geeignet.

Wenn die Reynolds-Zahlen sehr groß werden, also im Fall  $Re \rightarrow \infty$ , kann man die Navier-Stokes-Gleichungen dadurch vereinfachen, dass man den Viskositätseinfluss nur in einer dünnen Grenzschicht des zu untersuchenden Gebietes, z.B. an einer Wand, berücksichtigt. Die Ewald-Summation, deren Fehlerverhalten das Thema dieser Arbeit ist, setzt kleine Reynolds-Zahlen, also eine laminare Strömung, voraus. Ein Beispiel für deren Anwendung wäre, den Einfluss der langsamen Bewegungen kleiner Körper auf die Strömung der umgebenden Flüssigkeit zu untersuchen. [16]

## 2.2 Computersimulationen von hydrodynamischen Prozessen

Möchte man hydrodynamische Vorgänge simulieren, so kann man zunächst zwischen zwei grundsätzlichen Modellierungen unterscheiden: dem Kontinuum- und dem Teilchen-Ansatz.

Beim Kontinuum-Ansatz werden Masse, Momente und Strömungsenergie des Kontinuums als Basis für die Simulation genommen. Mathematisch gesehen handelt es sich um ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen, welches analytisch häufig nicht lösbar ist. Um Lösungsapproximationen zu erhalten, werden Zeit- und Raum-Diskretisierungen vorgenommen und die dadurch entstandenen Systeme mit Finite-Elemente-Methoden (FEM) bzw. Finite-Differenzen-Methoden (FDM) behandelt. Dabei wird in jedem Zeitschritt ein lineares Gleichungssystem gelöst und an den Diskretisierungspunkten werden Größen wie Dichte, Momente und Energie berechnet.

Im Gegensatz zum Kontinuum-Ansatz werden beim Teilchenansatz Wechselwirkungen zwischen einzelnen Teilchen bzw. Teilchengruppen betrachtet, deren Bewegungen nach den Newtonschen Gesetzen erfolgen. Dabei wird in jedem Simulationsschritt ein Sys-

tem von gewöhnlichen Differentialgleichungen gelöst und die Geschwindigkeiten und Positionen der Teilchen entsprechend dem Ergebnis verändert. Allgemeine physikalische Größen, die für das gesamte Teilchensystem gelten, werden sowohl über zeitliche und räumliche Mittelwerte von statistischen Funktionen der Teilchenpositionen und Geschwindigkeiten als auch über die Berechnungen der Korrelationsfunktionen und höherer Momente ermittelt. Simulationen unter Einbeziehungen der Wechselwirkungen zwischen Teilchen sind Gegenstand der Molekulardynamik.

Für viele Problemstellungen ist der Kontinuum-Ansatz nicht ausreichend präzise. Phänomene an mesoskopischen Skalen, bei denen thermische Funktionen oder auch inhomogene Mischungsverhältnisse relevant sein können, werden hier nicht berücksichtigt. Besonders bei der Untersuchung neuer Stoffe, Suspensionen oder chemischer Reaktionen wären die Molekular-Dynamik-Methoden geeigneter. Würde man aber das umgebende Medium nur aus rein molekularer Sicht betrachten, sich aber z.B. für den Einfluss der suspendierten Teilchen auf die Flüssigkeit interessieren, würde man den Großteil der Rechenkapazitäten mit der Simulation der Flüssigkeits-Moleküle belegen, ohne dass diese Information zum Gegenstand der Untersuchung nennenswert beiträgt.

In der Methode, auf der diese Arbeit basiert, kombiniert man beide Ansätze: man betrachtet die suspendierten Teilchen aus molekular-dynamischer Sicht, aber die Flüssigkeit, in der sie sich befinden, als Kontinuum. Um die Flüssigkeits-Geschwindigkeit abhängig von den darauf wirkenden Kräften zu berechnen, werden die Navier-Stokes-Gleichungen zugrunde gelegt.

### 2.2.1 Der Oseen-Tensor

Betrachtet man nur kleine Reynolds-Zahlen, d.h. kleine Geschwindigkeiten oder hohe Viskositäten, dann lassen sich die Navier-Stokes-Gleichungen linearisieren. Für den stationären Fall erhält man damit folgende Ausgangsgleichungen, die hier im dreidimensionalen Raum betrachtet werden [9]:

$$\begin{aligned} -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{f} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Wie in (2.1) ist  $p$  der Druck,  $\mathbf{v}$  die Flüssigkeits-Geschwindigkeit und  $\mathbf{f}$  die antreibende Kraft. Gesucht ist die Flüssigkeits-Geschwindigkeit am Ort  $\mathbf{r}'$  unter Einwirkung der Kraft am Ort  $\mathbf{r}$ . Eine Lösung dieser Gleichungen läßt sich mit Hilfe einer Greenschen Funktion angeben. Darin führt man anstelle von  $\mathbf{f}$  eine punktuelle Kraftdichte

$$\mathbf{f} = \mathbf{F} \cdot \delta(\mathbf{r})$$

ein, die nur am Ort  $\mathbf{r} = 0$  zum Zeitpunkt  $t = 0$  wirkt. Die allgemeine Lösung erhält man dann durch eine Linearkombination von Einzelbeiträgen. Gl. (2.2) geht dann über in

$$\begin{aligned} -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} + \mathbf{F} \delta(\mathbf{r}) &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Dabei ist  $\delta(\mathbf{r})$  die  $\delta$ -Distribution bzw. Dirac'sche  $\delta$ -Funktion. Führt man für (2.3) eine Fourier-Transformation durch, erhält man folgendes Ergebnis <sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} -i\mathbf{k}p_{\mathbf{k}} - \eta k^2 \mathbf{v}_{\mathbf{k}} + \mathbf{F} &= 0 \\ i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}_{\mathbf{k}} &= 0 \end{aligned} \quad (2.4)$$

Dabei sind  $p_{\mathbf{k}}$  und  $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$  die Fourier-Transformierten von  $p(\mathbf{r})$  und  $\mathbf{v}(\mathbf{r})$ .

Wenn man die erste Gleichung aus (2.4) mit  $i\mathbf{k}$  multipliziert und die zweite Gleichung in sie einsetzt, kann man den Druck  $p$  darstellen als

$$p_{\mathbf{k}} = -\frac{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{F}}{k^2} \quad (2.5)$$

Setzt man diesen Ausdruck in die erste Gleichung ein, erhält man für die Geschwindigkeit

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\eta k^2} \left[ \mathbf{1} - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}}{k^2} \right] \cdot \mathbf{F} \quad (2.6)$$

wobei  $\mathbf{1}$  die Einheitsmatrix ist und  $\mathbf{k}\mathbf{k}/k^2$  der Operator ist, der einen gegebenen Vektor auf  $\mathbf{k}$  projiziert. Die inverse Fourier-Transformation von  $k^{-2}$  ist  $1/(4\pi R)$  und die von  $\mathbf{k}\mathbf{k}/k^4$  ist  $(1/8\pi\eta R)/(\mathbf{1} - \mathbf{R}\mathbf{R}/R^2)$ . Wird die Gleichung (2.6) in den Ortsraum unter Berücksichtigung dieser Werte zurück transformiert, kann das gesuchte Geschwindigkeits-Feld über folgenden Ausdruck berechnet werden:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}') = \mathbf{T}^{(O)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \mathbf{F} \quad (2.7)$$

$$\mathbf{T}^{(O)}(\mathbf{R}) = \frac{1}{8\pi\eta R} \left[ \mathbf{1} + \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}}{R^2} \right] \quad \text{mit} \quad \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \quad (2.8)$$

$\mathbf{T}^{(O)}$  ist die Greensche Funktion der linearisierten Gleichungen und wird Oseen-Tensor genannt. Er stellt die Kopplung einer punktuell wirkenden Kraft mit dem Geschwindigkeitsfeld der Flüssigkeit im gesamten Raum dar. Dies entspricht einer idealisierten Situation, in der gelöste Teilchen als ausdehnungslos betrachtet werden. In realistischen Simulationen kann dies als Grenzfall verstanden werden, bei dem die Teilchen so weit voneinander entfernt sind, dass die Struktur bzw. deren Größe keinen Einfluss auf das gegenseitige Verhalten hat <sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Die Fourier-Transformation in drei Dimensionen ist definiert als:

$$\begin{aligned} \tilde{f}(\mathbf{k}) &= \int d^3r f(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \\ \tilde{f}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \end{aligned}$$

Für (2.3) bedeutet das:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi^3} \int d^3k \left( -i\mathbf{k}p(\mathbf{k}) - \eta k^2 \mathbf{v}(\mathbf{k}) + \mathbf{F} \right) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= 0 \\ \frac{1}{2\pi^3} \int d^3k \cdot i\mathbf{k} \cdot \mathbf{v}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} &= 0 \end{aligned}$$

<sup>2</sup>In Analogie dazu werden in der Astrophysik Sterne häufig als punktförmige Massenzentren approximiert.

### 2.2.2 Der Rotne-Prager-Tensor

Wie gesehen, ist eine Beschreibung einer Flüssigkeit auf dem Oseen-Level strikt nur gültig, wenn man es mit punktförmigen Kraftquellen zu tun hat. Betrachtet man gelöste Teilchen in einer Flüssigkeit als Quelle einer Kraft, die z.B. durch thermische Bewegungen auf das Medium übertragen wird, so haben diese Teilchen i.d.R. eine endliche Ausdehnung. Für diesen Fall ist der Oseen-Tensor aber nicht mehr i.a. positiv definit. Da er auf der anderen Seite eine Antwort-Funktion darstellt, ist dies aber eine notwendige Eigenschaft. Physikalisch gesehen würde dies bedeuten, dass die Flüssigkeit innerhalb des Teilchenvolumens ein Geschwindigkeits-Feld besitzt, mit dem das Teilchen selber wieder wechselwirken würde, was keinen Sinn ergibt.

Mit einem Variationsansatz konnte der Oseen-Tensor so erweitert werden, dass er positiv definit für endliche Teilchenvolumina ist [6].

Der resultierende Ausdruck, der Rotne-Prager-Tensor, stellt damit eine Verallgemeinerung des Oseen-Tensors dar, in der der Teilchenradius berücksichtigt wird. Die Flüssigkeits-Geschwindigkeit am Ort  $\mathbf{r}'$  kann genauso berechnet werden, wie in (2.7), mit dem Unterschied, dass statt des Oseen-Tensors der Rotne-Prager-Tensor verwendet wird [3, 11]:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}(\mathbf{R}) &= \frac{1}{6\pi\eta a} \left[ \frac{3}{4R} a \left( \mathbf{1} + \frac{\mathbf{R}\mathbf{R}}{R^2} \right) + \frac{a^3}{2R^3} \left( \mathbf{1} - \frac{3\mathbf{R}\mathbf{R}}{R^2} \right) \right] \quad \text{mit } \mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}' \\ \mathbf{M}(\mathbf{R}) &= \frac{1}{6\pi\eta a} \mathbf{1} \quad \text{für } \mathbf{r} = \mathbf{r}' \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dabei ist  $\eta$  die Flüssigkeits-Viskosität,  $a$  der Radius des Teilchens und  $\mathbf{1}$  die Einheitsmatrix.

Es muss jedoch berücksichtigt werden, dass der Rotne-Prager-Tensor keine Greensche Funktion des Problems ist und dadurch eine lineare Superposition von Einzelbeiträgen immer nur eine Näherung der Lösung darstellen kann.

Bisher wurde hier nur der Fall eines einzigen Teilchens betrachtet, das auf die Umgebungsflüssigkeit einwirkt. In den meisten Anwendungen möchte man aber ein Vielteilchen-System untersuchen, in dem die einzelnen Komponenten über das Medium auch miteinander wechselwirken. Hat man ein System mit praktisch unendlich vielen Teilchen und möchte die Flüssigkeits-Geschwindigkeit an einem Ort unter Berücksichtigung aller Kraftbeiträge bestimmen, ist dies allein vom rechentechnischen Standpunkt ohne weiteres nicht möglich. Man ist gezwungen, nur einen Systemausschnitt zu betrachten, und muss sich außerdem mit der korrekten Behandlung der langreichweitigen Wechselwirkungen auseinandersetzen.

### 2.2.3 Langreichweitige Wechselwirkungen

Wie bereits erwähnt, sind die hydrodynamischen Wechselwirkungen langreichweitig. Das bedeutet, dass auch der Einfluss von weiter entfernten Partikeln für das Systemverhalten relevant ist. Als eine Abschätzung für die Reichweite der Kräfte oder Potentiale

kann das Integral über ihren führenden Abstands-Term genommen werden:

$$\int \frac{1}{r^n} d\mathbf{r} = \begin{cases} \text{endlich,} & n > d \\ \infty, & n \leq d \end{cases} \quad (2.10)$$

Dabei ist  $d$  die Dimension des Systems [14].

Falls das Integral existiert, spricht man von kurzreichweitigen Wechselwirkungen, ansonsten von den langreichweitigen. Im 3-dimensionalen bezeichnet man Kräfte oder Potentiale, die langsamer als  $1/r^3$  abfallen, als langreichweitig. Typische Beispiele für kurzreichweitige Wechselwirkungen wären intramolekulare Wechselwirkungen, atomare Abstoßung oder das Lennard-Jones-Potential, zu langreichweitigen Wechselwirkungen gehören beispielsweise Gravitation und das Coulomb-Potential.

Wie man anhand (2.9) sehen kann, fällt die Wirkung einer Kraft in einer Flüssigkeit proportional zu  $1/r$  ab. Für eine Simulation heißt das, dass auch die Beiträge von unendlich weit entfernten Teilchen mitberücksichtigt werden müssen, um die exakte Lösung von (2.9) im Vielteilchen-System zu erhalten. Dies wiederum setzt ein unendlich großes System voraus, das man betrachten muss.

## 2.2.4 Periodische Randbedingungen

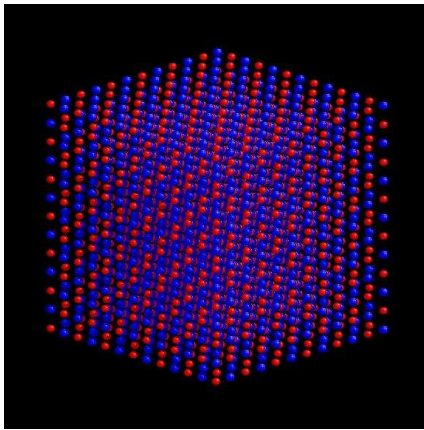
Möchte man das Verhalten eines unendlich großen Systems untersuchen, muss man einen endlichen Systemausschnitt simulieren und daraus Schlussfolgerungen auf die gesamte Problemstellung ziehen. Die Gefahr dabei ist, dass an den Ausschnittskanten Kraft- oder Potentialsprünge auftreten bzw. durch die Einschränkung des gesamten Systems Beiträge von weiter entfernten Komponenten vernachlässigt werden, die aber von Bedeutung sein können [13]. Dadurch kann das Simulationsergebnis sehr stark verzerrt oder zu ungenau werden. Man wird sich als erstes also überlegen müssen, wie man die Ränder des Systemausschnittes und den Ausschnitt selbst geeignet beschreibt.

Um solche physikalischen Seiteneffekte zu vermeiden und ein sehr großes System mit akzeptabler Genauigkeit zu simulieren, werden häufig periodische Randbedingungen angenommen. Dabei wird das zu untersuchende Simulationsgebiet mittels eines Gitters in Volumenboxen unterteilt, die aus einer Zentralbox und sog. Bildboxen bestehen. Die Zentralbox stellt häufig den zu untersuchenden Systemausschnitt dar, über die Bildboxen, die Kopien der Zentralbox sind, werden langreichweitige Kraft- oder Potentialbeiträge berücksichtigt.

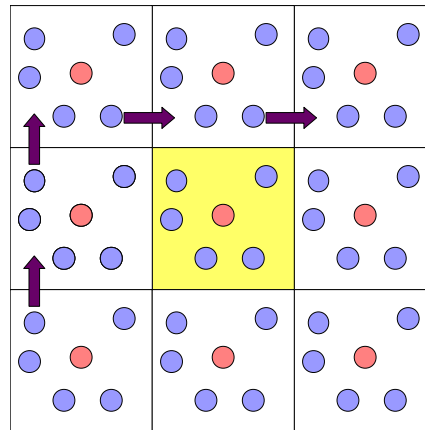
In der Natur findet sich die Idee für die periodischen Randbedingungen in Kristallstrukturen wieder und ist durch diese auch entstanden. Ein Kristall ist durch unendliche Wiederholung identischer Struktureinheiten charakterisiert und kann durch ein Gitter beschrieben werden, wobei den Gitterpunkten eine Gruppe von Atomen, die sog. Basis, zugeordnet ist (Abb. 2.1).

Periodische Randbedingungen sind dadurch charakterisiert, dass Teilchen über Boxgrenzen hinweg propagieren können. Verlässt ein Teilchen die Box, kommt es vom gegenüberliegenden Rand auf entsprechender Position wieder herein (Abb. 2.2). So bleibt die gesamte Anzahl der Teilchen in einer Box konstant. Damit sind die Ränder transparent, man hat keine unnatürliche Kraft- oder Potentialsprünge mehr an den Kanten und vermeidet physikalische Seiteneffekte.

Die einzelnen Boxen können über Gittervektoren adressiert werden, die vom Ursprung



**Abbildung 2.1:** Kristallstruktur von NaCl



**Abbildung 2.2:** Periodische Randbedingungen

der Zentralbox auf den Ursprung der Bildbox zeigen. Ein Gittervektor  $\mathbf{g}$  kann über den Richtungsvektor  $\mathbf{n}$  und die Boxlänge  $L$  definiert werden:  $\mathbf{g} = L \cdot \mathbf{n}$ . Die Positionen der einzelnen Bildteilchen sind dann  $\mathbf{r}_m = \mathbf{r}_0 + \mathbf{g}_m$ . Dabei sind  $\mathbf{r}_0$  die Position des Teilchens in der Zentralbox und  $\mathbf{g}_m$  der Gittervektor der  $m$ -ten Box.

Möchte man langreichweitige Wechselwirkungen über ein System mit periodischen Randbedingungen untersuchen, muss man unendlich viele Bildboxen betrachten, um die exakte Lösung des Problems zu erhalten. Da dies in einer Simulation nicht möglich ist, führt man den Abschneideparameter  $n_{max}$ , also die maximale Länge eines Gittervektors, ein, sodass die Kraftbeiträge von weiter entfernten Bildboxen vernachlässigt werden. Dies führt aber zu Approximationsfehlern und bringt immer noch einen erheblichen Rechenaufwand von  $O(N^2)$  mit sich, wobei  $N$  die Anzahl der zu simulierenden Teilchen ist, was besonders bei großen Systemen zu sehr zeitintensiven Berechnungen führen kann.

Ein Ansatz, um den Rechenaufwand zu reduzieren, wäre, die Wechselwirkungen nur für die Teilchen der Zentralbox mit den Teilchen innerhalb des sog. Cutoff-Radius zu betrachten. Bei konstanter Dichte der Teilchen und konstantem Cutoff-Radius erhält man mit Hilfe von Nachbarschaftslisten die Rechenkomplexität von  $O(N)$  (Abb. 2.3).

Der Nachteil dieses Ansatzes ist allerdings, dass der Approximationsfehler insbesondere für langreichweitige Wechselwirkungen sehr hoch wird, weil sehr viele Energie-Beiträge vernachlässigt werden. Gesucht ist also eine Methode, die ein präzises Ergebnis mit akzeptablen Kosten liefert.

### 2.2.5 Ewald-Summation

Die Ewald-Summation ist eine Methode, die ursprünglich für die Berechnung der Madelung-Konstante in Kristallen entwickelt wurde. Die Madelung-Konstante gibt den Energiegehalt eines Ions im Kristallgitter an und ist vom Coulomb-Gesetz für punktförmige Ladungen abgeleitet [17].

Das Coulomb-Gesetz beschreibt elektrostatische Wechselwirkungen, die langreichweitig sind und proportional zu  $1/r$  abfallen. Würde man sie in einem dreidimensionalen System mit periodischen Randbedingungen berechnen wollen, müsste man über unendlich

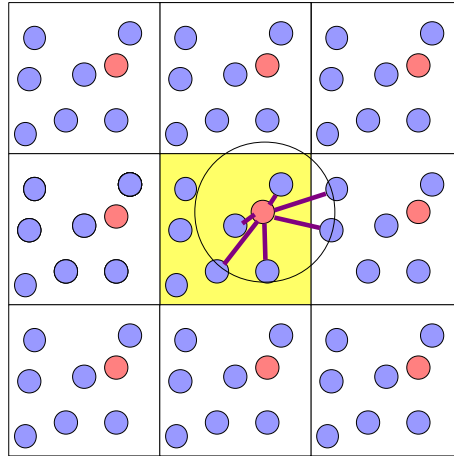


Abbildung 2.3: Cutoff-Radius

viele Gitterboxen gehen und Wechselwirkungen zwischen allen Teilchenpaaren in jeder Box aufsummieren:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}}' \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{\|\mathbf{r}_{ij,\mathbf{n}}\|_2} \quad (2.11)$$

Dabei sind  $q_i$  und  $q_j$  die Ladungen der Teilchen  $i$  und  $j$  und  $\|\mathbf{r}_{ij}\|_2 = \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j + \mathbf{n} \cdot L\|_2$  der Abstand zwischen ihnen. Die äußere Summe geht über unendlich viele Gittervektoren, und die beiden inneren Summen laufen über alle Teilchenpaare. Da die Ladungen i.d.R. unterschiedliche Vorzeichen aufweisen, ist die Summe (2.11) alternierend und im dreidimensionalen nur bedingt konvergent.

Der Ansatz von Ewald besteht darin, einen exponentiellen Konvergenzfaktor  $e^{-ns}$  für die Berechnung der Summe einzuführen und am Ende der Berechnungen  $s \rightarrow 0$  gehen zu lassen. Dadurch wird die absolute Konvergenz der Summe erreicht [14].

Im ursprünglichen Verfahren von Ewald wird die eine Summe mit Hilfe dieses Konvergenzfaktors in zwei Summen aufgespalten, die jeweils eine schnelle Konvergenz aufweisen [1]. Dieses Verfahren kann man heuristisch auch durch die direkte Aufspaltung erreichen, in dem man eine Funktion einführt, über die man einen Nah- und einen Fernfeld-Anteil definieren kann. In dem einen Teil werden daher die Wechselwirkungen im unmittelbaren Umfeld des aktuellen Teilchens berechnet (Nahfeld- bzw. kurzreichweitiger Anteil), im anderen Teil die Beiträge weiter entfernter Teilchen erfasst (Fernfeld- oder langreichweitiger Anteil). Dabei finden die Berechnungen der Nahfeld-Summe im Ortsraum und die Berechnungen der Fernfeld-Summe im reziproken Raum, dem Fourier-Raum, statt.

Bei den Berechnungen im Fourier-Raum werden auch die Wechselwirkungen des Teilchens mit sich selbst aufsummiert. Dies muss später durch einen zusätzlichen Korrekturterm berücksichtigt werden.

Die ursprüngliche Summe (2.11) wird also folgendermaßen umgeformt:

$$U = \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{r_{ij,\mathbf{n}}} \cdot (1 - F(r_{ij,\mathbf{n}}))}_{\text{Nahfeld-Anteil}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \frac{q_i q_j}{r_{ij,\mathbf{n}}} \cdot F(r_{ij,\mathbf{n}})}_{\text{Fernfeld-Anteil}} \quad (2.12)$$

$F(r)$  ist die Funktion, die den Exponentialfaktor enthält. Von Ewald wurden dafür ursprünglich die Fehlerfunktion und die komplementäre Fehlerfunktion genommen. Sie sind folgendermaßen definiert:

$$\begin{aligned} F(x) &= \operatorname{erf}(x) = 1 - \operatorname{erfc}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \\ 1 - F(x) &= \operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt \end{aligned} \quad (2.13)$$

Physikalisch bedeutet das, dass jede Punktladung im System mit einer verschmierten Ladung entgegengesetzten Vorzeichens umgeben wird. Als Verschmierungsfunktion wird häufig die Gauß-Verteilung genommen (Abb. 2.4). Dadurch wird die Reichweite der ursprünglichen Ladung reduziert und eine schnelle Konvergenz im Ortsraum, also für die Nahfeld-Summe, erreicht.

Die verschmierten Ladungen werden durch die gleichen Ladungen mit entgegenge-

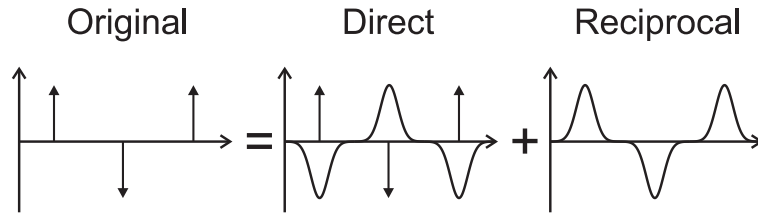


Abbildung 2.4: Verschmierung der Punktladungen bei der Ewald-Summation

setztem Vorzeichen kompensiert. Berechnet man diese Kompensation im Fourier-Raum, erreicht man eine schnelle Konvergenz des Fernfeld-Anteils der Summe. Dies ist darauf zurückzuführen, dass große Abstände im Ortsraum, über die die langreichweitigen Wechselwirkungen erfasst werden, kleinen Wellenzahlen im Fourier-Raum entsprechen. Man braucht also nur über wenige Gittervektoren im Fourier-Raum aufzusummieren, um langreichweitige Beiträge abzudecken.

Die Verschmierungsfunktion im Ewald-Ansatz ist eine Gauß-Verteilung, bei der ausser der Position des Teilchens  $\mathbf{r}$  auch ein Parameter  $\alpha$  entscheidend ist:

$$\rho_i(\mathbf{r}) = q_i \cdot \alpha^3 \exp(-\alpha^2 r^2) / \sqrt{\pi} \quad (2.14)$$

Der Parameter  $\alpha$  bestimmt die Breite der Verschmierungsfunktion und ist für die Konvergenzverteilung zwischen dem Nahfeld- und dem Fernfeld-Anteil der Wechselwirkungen maßgeblich.

Die komplementäre Fehlerfunktion  $F(r_{ij})$  aus (2.12) ist als  $F(r_{ij}) = \operatorname{erfc}(\alpha \cdot r_{ij})$  definiert und sorgt für die Konvergenz der Nahfeld-Summe. Für  $\alpha \rightarrow \infty$  geht  $\operatorname{erfc}(\alpha r)$  gegen 0. D.h. je schmaler die Verschmierungsfunktion ist, desto schneller konvergiert der Nahfeld-Anteil und desto weniger Bildboxen muss man in der Summation berücksichtigen.

Die Fehlerfunktion der Fernfeld-Summe sieht nach der Fourier-Transformation so aus:

$$F_k = \exp(-(\pi k^2 / \alpha^2) + 2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$$

Hier ist die Konvergenz umso besser, je kleiner das  $\alpha$  gewählt wird. In einer Simulation, in der die Ewald-Summation eingesetzt wird, muss der Parameter  $\alpha$  so gewählt werden, dass einerseits die gute Lösungsgenauigkeit für beide Teilsummen erreicht wird, andererseits aber auch die Laufzeit akzeptabel bleibt.



### 2.2.6 Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors

Die Methode der Ewald-Summation kann auch auf die hydrodynamischen Wechselwirkungen angewendet werden, vorausgesetzt, man entscheidet sich bei der Simulation für periodische Randbedingungen. Gegeben ist also ein System mit  $N$  Teilchen in einer inkompressiblen Flüssigkeit, die Kräfte ausüben und deren Einfluss auf die Flüssigkeits-Geschwindigkeit über periodische Randbedingungen simuliert wird. Dabei beinhaltet die Zentralbox das System selbst, und die Bildboxen dienen zur Erfassung langreichweitiger Wechselwirkungen. Die Summe, die hier berechnet werden muss und die gleichen Schwierigkeiten wie das Coulomb-Potential aufweist, ist [3]

$$\mathbf{S}_{i_0} = \sum_l \left( \sum_{i=1}^N \mathbf{M}_{i_0 l_0, i l} \cdot \mathbf{F}_i \right) \quad (2.15)$$

$\mathbf{S}_{i_0}$  ist der Geschwindigkeits-Vektor der Flüssigkeit am Ort des  $i_0$ -ten Teilchens und  $\mathbf{M}_{i_0 l_0, i l}$  ist der Rotne-Prager-Tensor (2.9) für das Teilchenpaar  $i_0$  in der Zentralbox  $l_0$  und  $i$  in der Bildbox  $l$ .  $\mathbf{F}_i$  ist die Kraft, die vom  $i$ -ten Teilchen auf die umgebende Flüssigkeit ausgeübt wird. Hierbei läuft die äußere Summe über unendlich viele Bildboxen und die innere Summe über alle Teilchen innerhalb dieser Boxen. Für die Summe aller Kräfte in der Zentralbox soll gelten:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i = 0$$

Um (2.15) als Ewald-Summation darzustellen, betrachtet man zunächst eine alternative Darstellung des Rotne-Prager-Tensors [3]:

$$6\pi\eta a \mathbf{M}_{i_0 l_0, i l} = \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) |\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0 l_0}|, \quad (i, l) \neq (i_0, l_0) \quad (2.16)$$

$$\mathbf{M}_{i_0 l_0, i_0 l_0} = (6\pi\eta a)^{-1} \mathbf{1}. \quad (2.17)$$

Dabei ist  $\nabla = \partial/\partial(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0 l_0})$  der Nabla-Operator,  $\mathbf{1}$  die Einheitsmatrix,  $a$  der Radius des Teilchens und  $\mathbf{R}_{il}$  und  $\mathbf{R}_{i_0 l_0}$  die Positionen der Teilchen  $i$  in der Bildbox  $l$  und  $i_0$  in der Zentralbox  $l_0$ .

Sei  $\mathbf{r} = \mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0 l_0}$ . Es ändert sich nichts, wenn man Gl. (2.16) in folgender Weise aufspaltet:

$$\begin{aligned} 6\pi\eta a \mathbf{M}_{i_0 l_0, i l} &= \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}) \\ &= \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) \{r \operatorname{erfc}(\xi r)\} \\ &\quad + \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) \{r \operatorname{erf}(\xi r)\} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Hierbei ist  $\operatorname{erf}(\xi r)$  die Fehlerfunktion und  $\operatorname{erfc}(\xi r)$  die komplementäre Fehlerfunktion, die bereits in (2.13) definiert wurden. Der Parameter  $\xi$  kontrolliert die Breite der Aufspaltung in zwei Ausdrücke und entspricht dem Parameter  $\alpha$  aus (2.14).

Setzt man (2.18) in die Gleichung für die Flüssigkeits-Geschwindigkeit (2.15) ein, erhält

man folgenden Ausdruck:

$$\begin{aligned}
 6\pi\eta a\mathbf{S}_{i_0} = & \mathbf{F}_{i_0} + \sum_{\substack{l \\ (i,l) \neq (i_0,l_0)}} \sum_{i=1}^N \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_i \\
 & - \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r} = 0) \cdot \mathbf{F}_{i_0} \\
 & + \sum_l \sum_{i=1}^N \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}_i
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

Die erste Doppelsumme weist schnelle Konvergenz für große Abstände  $\mathbf{r}$  im Ortsraum auf und entspricht dem Nahfeld-Anteil der Ewald-Summation für elektrostatische Wechselwirkungen ((2.12)), die zweite Doppelsumme konvergiert schnell im Fourier-Raum und stellt den Fernfeld-Anteil der Wechselwirkungen dar.

$\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r} = 0)$  ist der erforderliche Korrekturterm, der durch das Aufsummieren der Wechselwirkungen des Teilchens mit sich selbst zustandekommt.

Wendet man die Fourier-Transformation  $g(\mathbf{k}) = \int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} g(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$  auf  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r})$  an und rechnet sowohl  $\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r})$  als auch den Korrekturterm  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r} = 0)$  aus, erhält man folgendes Gesamtergebnis:

$$\begin{aligned}
 6\pi\eta a\mathbf{S}_{i_0} = & (1 - 6\pi^{-1/2}\zeta a + \frac{40}{3}\pi^{-1/2}\zeta^3 a^3)\mathbf{F}_{i_0} \\
 & + \sum_{\substack{l \\ R_{il} \neq R_{i_0l_0}}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0})\mathbf{F}_i \\
 & + V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda)\mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\},
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

wobei

$$\begin{aligned}
 \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}) = & \mathbf{1}\left\{\left(\frac{3}{4}ar^{-1} + \frac{1}{2}a^3r^{-3}\right)\text{erfc}(\zeta r) + (4\zeta^7a^3r^4 + 3\zeta^3ar^2 - 20\zeta^5a^3r^2 \right. \\
 & \left. - \frac{9}{2}\zeta a + 14\zeta^3a^3 + \zeta a^3r^{-2})\pi^{-1/2}\exp(-\zeta^2r^2)\right\} \\
 & + \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}\left\{\left(\frac{3}{4}ar^{-1} - \frac{3}{2}a^3r^{-3}\right)\text{erfc}(\zeta r) + (-4\zeta^7a^3r^4 - 3\zeta^3ar^2 \right. \\
 & \left. + 16\zeta^5a^3r^2 + \frac{3}{2}\zeta a - 2\zeta^3a^3 - 3\zeta a^3r^{-2})\pi^{-1/2}\exp(-\zeta^2r^2)\right\},
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

und

$$\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}) = (\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})\left(a - \frac{1}{3}a^3k^2\right)\left(1 + \frac{1}{4}\zeta^{-2}k^2 + \frac{1}{8}\zeta^{-4}k^4\right)6\pi k^{-2}\exp\left(-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k^2\right) \tag{2.22}$$

$\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}$  und  $\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}$  sind Projektoren und werden durch dyadische Produkte der entsprechenden Vektoren gebildet und durch das Quadrat der Vektorlänge dividiert<sup>3</sup>.

<sup>3</sup>Ein dyadisches Produkt wird wie folgt gebildet:

$$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_x & b_y & b_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_x b_x & a_x b_y & a_x b_z \\ a_y b_x & a_y b_y & a_y b_z \\ a_z b_x & a_z b_y & a_z b_z \end{pmatrix}$$

Wie man anhand der Gleichung (2.20) sehen kann, müssen für das exakte Ergebnis unendlich viele Beiträge aufsummiert werden. Bei einer Computersimulation müssen daher die unendlichen Summen durch die endliche Summation ersetzt werden, was die exakte Lösung unmöglich macht. Aber nicht nur die äußeren Summen werden beschränkt, auch die innere Summe über alle vorhandenen Teilchen einer Gitterbox muss u.U. abgeschnitten werden, um die Laufzeit von  $O(N^2)$  durch das Einführen des Cutoff-Radius zu reduzieren. Die unmittelbare Frage, die sich dabei stellt, ist, wie man die Abschneideparameter wählen muss, so dass der entstehende Fehler akzeptabel bleibt. Diese Frage ist das zentrale Thema der vorliegenden Masterarbeit, und das Ergebnis wird in den nächsten Kapiteln dargestellt.

---

### 3 Fehlerabschätzung

Wie bereits im vorigen Kapitel angedeutet, hängt die Güte der Lösungsnaherung für die Gleichung (2.20) ausschließlich von den Abschneideparameter der Nah- und Fernfeld-Summen ab. Je größer sie werden, also je mehr Summanden berücksichtigt werden, desto genauer wird die Lösung. Der einfachste Ansatz, um eine möglichst gute Näherung zu erhalten, wäre, die Summen möglichst lange laufen zu lassen, die Abschneideparameter also so hoch wie möglich zu setzen. Die Schwierigkeit dabei ist allerdings, dass für große Systeme mit hoher Teilchenanzahl die Simulation zu rechenintensiv wird. Außerdem ist nicht sicher, dass sich der Fehler linear zur Laufzeit verhält, dass also die gewonnene Approximationsverbesserung die langen Rechenzeiten rechtfertigt. Aus diesem Grund ist es sinnvoll, anhand einer vorgegebenen Fehlerschranke die Abschneideparameter bestimmen zu können und damit unnötige Berechnungen zu vermeiden. Gesucht ist also eine Funktion, die die Abhängigkeit des Fehlers von den Abschneideparametern darstellt.

Seien im folgenden  $R_c$  und  $K_{max}$  die Abschneideparameter der Nah- und Fernfeld-Summe. Dabei ist  $R_c$  der sog. Cutoff-Radius, der schon im Kapitel 2.2 erwähnt wurde. Er beschränkt die Anzahl der zu berücksichtigenden Teilchenpaare, sodass nur diejenigen Teilchen in die Berechnung der Wechselwirkungen einbezogen werden, die innerhalb des Cutoff-Radius liegen. Es ist erwünscht, seine Länge kleiner gleich der halben Boxlänge  $L/2$  zu wählen, da man bis zu diesem Wert auf das Betrachten der Bildboxen verzichten kann. Die Abmessungen des relevanten Bereichs sind dann kleiner als die Zentralbox, d.h. jedes Teilchen kann maximal ein mal innerhalb des Cutoff-Radius vorhanden sein. Es wird vor der jeweiligen Entfernungsberechnung gegebenenfalls an die Stelle transportiert, an der es sich in einer Bildbox befände. Der entsprechende Algorithmus heißt Minimum Image Convention [13].

Der Vektor  $K_{max}$  steuert die Anzahl der Summanden bei der Fernfeld-Summe im Fourier-Raum. Seine Länge stellt den Radius dar, innerhalb dessen die langreichweitigen Wechselwirkungen erfasst werden.

Da die Nah- und Fernfeld-Summe in unterschiedlichen Räumen ausgerechnet werden und ihre Abschneideparameter  $R_c$  und  $K_{max}$  voneinander unabhängig sind, war es naheliegend, den Approximationsfehler in zwei Teile aufzuspalten und die einzelnen Teile getrennt zu betrachten. Damit wird der Gesamtfehler als zweidimensionaler Vektor dargestellt, dessen Länge die Abweichung von der exakten Lösung angibt:

$$\varepsilon_{ges} = \begin{pmatrix} \varepsilon_{nah} \\ \varepsilon_{fern} \end{pmatrix} \quad \text{mit} \quad \|\varepsilon_{ges}\|_2 = \text{const} = \sqrt{\varepsilon_{nah}^2 + \varepsilon_{fern}^2} \quad (3.1)$$

Außerdem ist es sinnvoll, dass die Fehler für die Nah- und Fernfeld-Summen gleich groß sind, es soll also gelten:  $\varepsilon_{nah} = \varepsilon_{fern}$ . Nah- und Fernfeldfehler sind definiert als

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nah} &:= f(R_c, \zeta) \\ \varepsilon_{fern} &:= f(K_{max}, \zeta) \end{aligned} \quad (3.2)$$

und sind damit Funktionen der entsprechenden Abschneideparameter. Im folgenden werden sie genauer untersucht.

### 3.1 Allgemeine Fehlerberechnung der Nahfeld-Summe

Der Term aus der Gleichung (2.20), der hier zuerst betrachtet wird, ist

$$\frac{1}{6\pi\eta a} \sum_l \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0}) \mathbf{F}_i := \mathbf{S}_{i_0l_0}^N \quad (3.3)$$

Der Fehler  $\varepsilon_{nah}^*$  sei die Betragssummennorm der Differenz zwischen der exakten Lösung  $\mathbf{S}_{i_0l_0}^N$  und der Näherungslösung  $\tilde{\mathbf{S}}_{i_0l_0}^N$ :

$$\varepsilon_{nah}^* := \|\mathbf{S}_{i_0l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0l_0}^N\|_1 \quad (3.4)$$

Die Betragssummennorm eines Vektors ist definiert als  $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^d |x_i|$ , wobei  $d$  die Dimension des Vektors darstellt. In dieser Arbeit wird von einem dreidimensionalen System ausgegangen, deswegen ist hier  $d = 3$ .

Für die Differenz zwischen exakter und Näherungslösung gilt:

$$\begin{aligned} 6\pi\eta a \cdot (\mathbf{S}_{i_0l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0l_0}^N) &= \sum_l \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0}) \mathbf{F}_i \\ &\quad - \sum_l \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0}) \mathbf{F}_i \\ &\quad \quad \quad R_{il} - R_{i_0l_0} \leq R_c \\ &= \sum_l \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0}) \mathbf{F}_i \\ &\quad \quad \quad R_{il} - R_{i_0l_0} > R_c \\ &= \sum_l \sum_{i=1}^n \{ \mathbf{1} \cdot T_1(R_{il} - R_{i_0l_0}) + \hat{\mathbf{r}} \cdot T_2(R_{il} - R_{i_0l_0}) \} \mathbf{F}_i \\ &\quad \quad \quad R_{il} - R_{i_0l_0} > R_c \end{aligned} \quad (3.5)$$

Damit werden alle Teilchen betrachtet, die außerhalb des Cutoff-Radius liegen.

$T_1(r)$  und  $T_2(r)$  sind die Funktions-Vorfaktoren aus der Gleichung (2.21), nachdem diese Gleichung auf beiden Seiten durch  $a$  dividiert wurde:

$$\begin{aligned} T_1(r) &= \left( \frac{3}{4}r^{-1} + \frac{1}{2}a^2r^{-3} \right) \text{erfc}(\xi r) + (4\xi^7 a^2 r^4 + 3\xi^3 r^2 \\ &\quad - 20\xi^5 a^2 r^2 - \frac{9}{2}\xi + 14\xi^3 a^2 + \xi a^2 r^{-2}) \pi^{-1/2} \exp(-\xi^2 r^2) \end{aligned} \quad (3.6)$$

und

$$\begin{aligned} T_2(r) &= \left( \frac{3}{4}r^{-1} - \frac{3}{2}a^2r^{-3} \right) \text{erfc}(\xi r) + (-4\xi^7 a^2 r^4 - 3\xi^3 r^2 \\ &\quad + 16\xi^5 a^2 r^2 + \frac{3}{2}\xi - 2\xi^3 a^2 - 3\xi a^2 r^{-2}) \pi^{-1/2} \exp(-\xi^2 r^2) \end{aligned} \quad (3.7)$$

Sei  $\mathbf{r}_{il} = \mathbf{R}_{il} - \mathbf{R}_{i_0l_0}$ . Für die Betragssummennorm gilt nach der Dreiecksungleichung, Homogenitäts- und Submultiplikativitäts-Eigenschaft:

$$\begin{aligned}
 6\pi\eta a \cdot \|\mathbf{S}_{i_0l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0l_0}^N\|_1 &\leq \sum_l \sum_{i=1}^n \|\mathbf{1} T_1(r_{il}) \cdot \mathbf{F}_i\|_1 + \sum_l \sum_{i=1}^n \|\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}^T T_2(r_{il}) \cdot \mathbf{F}_i\|_1 \\
 &= \sum_l \sum_{i=1}^n |T_1(r_{il})| \cdot \|\mathbf{1} \cdot \mathbf{F}_i\|_1 + \sum_l \sum_{i=1}^n |T_2(r_{il})| \cdot \|\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}^T \cdot \mathbf{F}_i\|_1 \\
 &\leq \sum_l \sum_{i=1}^n |T_1(r_{il})| \cdot \|\mathbf{1}\|_1 \cdot \|\mathbf{F}_i\|_1 + \sum_l \sum_{i=1}^n |T_2(r_{il})| \cdot \|\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}^T\| \cdot \|\mathbf{F}_i\|_1
 \end{aligned} \tag{3.8}$$

Die einzelnen Matrizen von (3.8) kann man wie folgt abschätzen: Die Spaltensummennorm der Einheitsmatrix  $\mathbf{1}$  ist 1. Für jedes Element der Projektor-Matrix

$$\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}^T := (\mathbf{r} \otimes \mathbf{r}) / r^2$$

gilt:

$$|a_{ij}| < 1 \quad \text{für} \quad 1 \leq i, j \leq 3 \tag{3.9}$$

Für ihre Norm bedeutet das

$$\|\hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}}^T\|_1 = \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |a_{ij}| < \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |1| = 3 \tag{3.10}$$

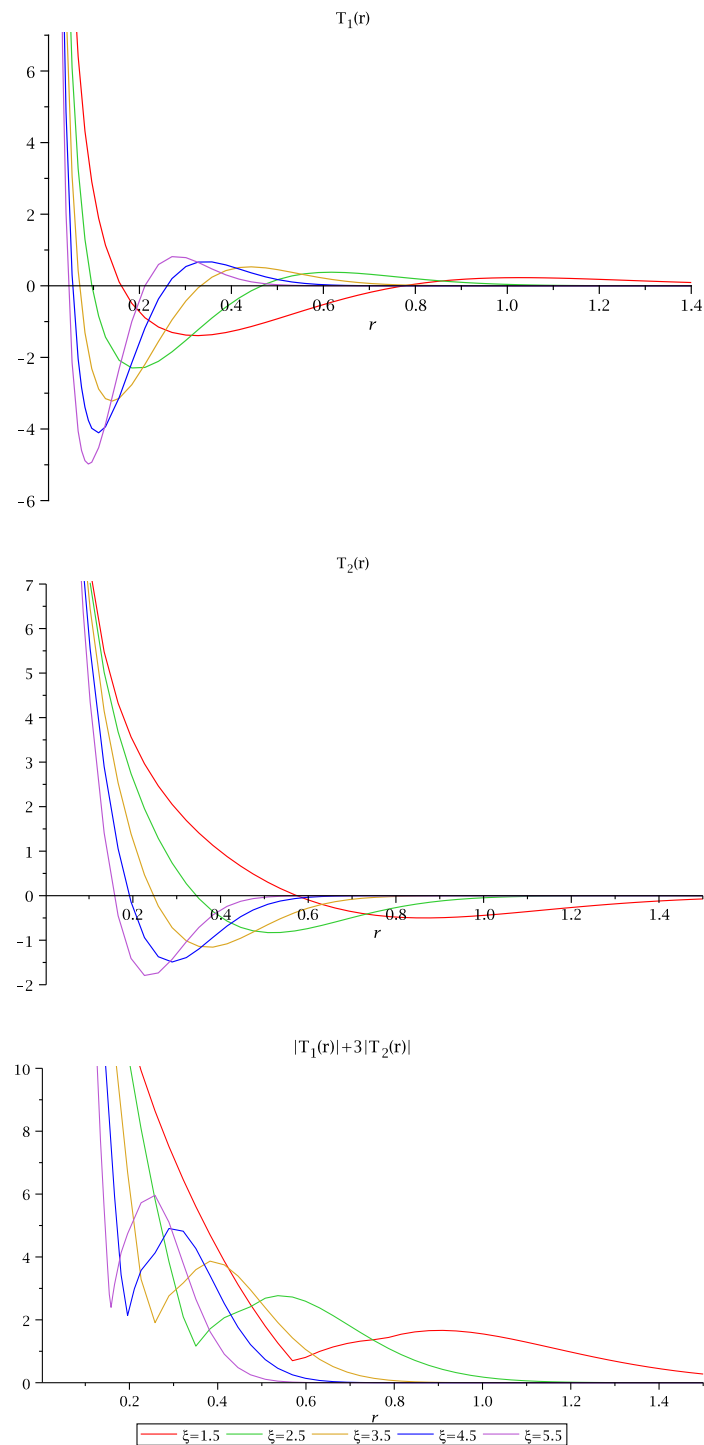
Damit gilt für die Abschätzung der Nahfeld-Summe:

$$\varepsilon_{nah}^* = \|\mathbf{S}_{i_0l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0l_0}^N\|_1 < \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot \sum_l \sum_{i=1}^n \{|T_1(r)| + 3|T_2(r)|\} \cdot \|\mathbf{F}_i\|_1 \tag{3.11}$$

Am Anfang des Kapitels wurde erwähnt, dass die Näherung umso besser ist, je mehr Summanden man berücksichtigt. Bezogen auf das Ergebnis (3.11) bedeutet das, dass der Approximationsfehler mit größer werdender oberer Schranke  $l_{max}$  der äußeren Summe abnimmt. Diese Überlegung könnte zur Schlussfolgerung führen, dass sich die Approximation, ausgehend von einem beliebig kleinen Cutoff-Radius, immer dadurch verbessern liesse, dass man den Cutoff-Radius einfach erhöht. Wenn man sich allerdings die Funktionen  $T_1(r)$  und  $T_2(r)$  genauer anschaut, stellt man fest, dass sie bis zu einem bestimmten Wert  $R_{min}$  Oszillationen aufweisen und erst danach mit wachsenden Teilchen-Abstand monoton gegen 0 gehen (Abb. 3.1). Das bedeutet, dass das Vergrößern des Cutoff-Radius erst ab einem bestimmten Mindestwert zur Verbesserung der Lösungs-näherung führt, dass also die Fehlerabschätzungs-Funktion erst ab einem bestimmten Bereich gilt. Aus der Anwendungssicht ist es wichtig, diesen Mindestwert  $R_{min}$  zu kennen, damit die Fehlerabschätzungs-Funktion richtig eingesetzt werden kann.

Im folgenden werden die Funktionen  $T_1(r)$  und  $T_2(r)$  zuerst auf Extremstellen untersucht, um den Mindest-Cutoff-Radius, also den größten positiven Wert  $r$  zu bestimmen, an dem der letzte Extremwert vorliegt und ab dem sie monoton werden. Dabei beziehen sich alle Abbildungen und Beispiele für Parameterwerte auf ein auf die Boxlänge normiertes System. Für ein allgemeines System muss man alle Ergebnisse mit der Boxlänge  $L$  multiplizieren, um die richtige Skalierung zu erhalten.

Nach der Ermittlung der Extremstellen wird die Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe durchgeführt.



**Abbildung 3.1:** Funktionen der Fehlerabschätzung für die Nahfeld-Summe beim Teilchen-Radius  $a = 0.01$

### 3.1.1 Bestimmung der Extremstellen

Zur analytischen Bestimmung der Extremstellen einer Funktion bildet man die erste Ableitung der Funktion und bestimmt deren Nullstellen. An diesen Nullstellen liegt dann möglicherweise ein Extremum vor. Weil die Ableitungen der Funktionen  $T_1(r)$  und  $T_2(r)$  sehr komplex sind, ist die analytische Bestimmung der Nullstellen für sie nicht möglich. Aus diesem Grund wurden sie hier durch andere Funktionen approximiert, und für diese Approximation wurden dann die Nullstellen ermittelt.

#### Berechnung der Extremstellen für $T_1(r)$

Zuerst wird die Funktion  $T_1(r)$  betrachtet. In Abb. 3.1 ist deutlich zu erkennen, dass sie ab einem bestimmten Bereich von oben gegen 0 konvergiert. Damit ist  $T_1(r)$  nach unten durch 0 beschränkt. Ihre Ableitung ergibt:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_1}{\partial r} = & \left( -\frac{3}{4r^2} - \frac{3}{2r^4}a^2 \right) \operatorname{erfc}(\xi r) \\ & - 2 \left( \frac{3}{4r} + \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^3} \right) \cdot \xi \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \\ & + \left( 16\xi^7 a^2 r^3 + 6\xi^3 r - 40\xi^5 a^2 r - \frac{2\xi a^2}{r^3} \right) \cdot \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \\ & - 2 \left( 4\xi^7 a^2 r^4 + 3\xi^3 r^2 - 20\xi^5 a^2 r^2 - \frac{9}{2}\xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{r^2} \right) \xi^2 r \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Als erstes wird die komplementäre Fehlerfunktion durch einen einfacheren Term ersetzt. Die komplementäre Fehlerfunktion ist nach unten und oben beschränkt [2, 8]<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi} \left( x + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} e^{-x^2} & \leq \operatorname{erfc}(x) \leq \frac{1}{\sqrt{\pi} x} e^{-x^2}, \quad \text{bzw.} \\ \frac{1}{\sqrt{\pi} \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} e^{-\xi^2 r^2} & \leq \operatorname{erfc}(\xi r) \leq \frac{1}{\sqrt{\pi} \xi r} e^{-\xi^2 r^2} \quad \text{für } x = \xi r \end{aligned} \quad (3.13)$$

Weil der Term, der die komplementäre Fehlerfunktion enthält, in der Ableitung (3.12) negativ ist, wird die Ableitung von  $T_1(r)$  nach oben abgeschätzt, in dem die komplementäre

---

<sup>1</sup>Nach [8] gilt:  $\operatorname{erfc}(x) > \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-x^2}}{x + \sqrt{x^2 + 2}}$ . Damit gilt aber auch:  $\operatorname{erfc}(x) > \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-x^2}}{2x + \sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \left( x + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)}$

---



Fehlerfunktion nach unten abgeschätzt wird. Das Einsetzen von (3.13) in Gl. (3.12) ergibt:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial T_1}{\partial r} \leq & \left( -\frac{3}{4r^2} - \frac{3}{2r^4}a^2 \right) \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi} \cdot \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} \\
& - 2 \left( \frac{3}{4r} + \frac{1}{2} \frac{a^2}{r^3} \right) \cdot \xi \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \\
& + \left( 16\xi^7 a^2 r^3 + 6\xi^3 r - 40\xi^5 a^2 r - \frac{2\xi a^2}{r^3} \right) \cdot \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \\
& - 2 \left( 4\xi^7 a^2 r^4 + 3\xi^3 r^2 - 20\xi^5 a^2 r^2 - \frac{9}{2}\xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{r^2} \right) \xi^2 r \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} := D_{T_1}^*(r)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Um die analytische Bestimmung von Nullstellen der Funktion  $D_{T_1}^*(r)$  zu vereinfachen, wird sie in Summe zweier Funktionen aufgespalten und diese einzelne Funktionen werden dann auf Nullstellen untersucht.  $D_{T_1}^*(r)$  kann folgendermaßen zerlegt werden:

$$\begin{aligned}
D_{T_1}^*(r) &= \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{3}{4r^2 \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} - \frac{3\xi}{2r} + 15\xi^3 r - 6\xi^5 r^3 \right) \\
&+ \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \cdot a^2 \left( -\frac{3}{2r^4 \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} - \frac{3\xi}{r^3} + 56\xi^7 r^3 - 68\xi^5 r - 8\xi^9 r^5 - \frac{2\xi^3}{r} \right) \\
&= D_{T_1}^{*(O)}(r) + D_{T_1}^{*(A)}(r)
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Der erste Teil  $D_{T_1}^{*(O)}(r)$  ist unabhängig vom Teilchenradius  $a$ , der zweite Teil  $D_{T_1}^{*(A)}(r)$  enthält nur die Terme mit dem Teilchenradius  $a$ .

Die größte positive reelle Nullstelle der Funktion  $D_{T_1}^{*(O)}(r)$  ist

$$r_1^o \approx \frac{1,542665}{\xi}. \tag{3.16}$$

Die Überprüfung des Wertes der zweiten Ableitung an dieser Stelle ergibt, dass hier ein Maximum vorliegt.

Die Bestimmung der Nullstellen des zweiten Teils  $D_{T_1}^{*(A)}(r)$  ist komplizierter. Abb. 3.2 zeigt denjenigen Teil der Funktion  $T_1(r)$ , der den Teilchenradius  $a$  enthält. Er wird als Kurvenschar abhängig von unterschiedlichen Parametern dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Lage der Extremstellen ausschließlich vom Parameter  $\xi$  beeinflusst wird. Der Teilchenradius  $a$  bestimmt dagegen nur die Höhe des Extremwertes.

Die größte positive reelle Nullstelle der Funktion  $D_{T_1}^{*(A)}(r)$  liegt bei

$$r_1^a \approx \frac{2,32832029}{\xi}. \tag{3.17}$$

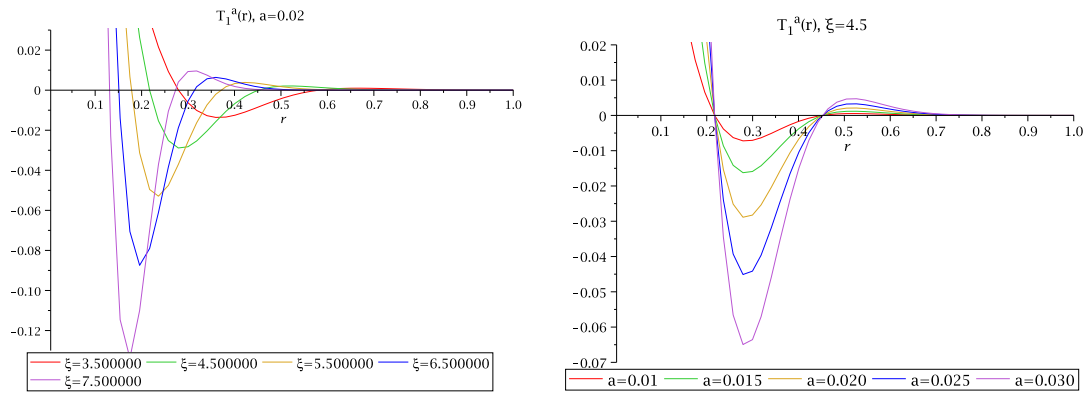


Abbildung 3.2: Funktion  $T_1(r)$  nur mit  $a$ -Termen bei unterschiedlichen Parametern

Weil für alle  $r > r_1^a$  Ihre Funktionswerte und damit auch die Ableitung der ursprünglichen Funktion  $T_1(r)$  negativ bleiben, lässt sich auf die Monotonie von  $T_1(r)$  schließen. Damit ist die Funktion  $T_1(r)$  für alle  $r > r_1^a$  monoton fallend gegen 0.

### Berechnung der Extremstellen für $T_2(r)$

Die Untersuchung der Ableitung der Funktion  $T_2(r)$  erfolgt analog. Die Ableitung von  $T_2(r)$  ist folgende:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_2}{\partial r} = & \left( -\frac{3}{4r^2} + \frac{9a^2}{2r^4} \right) \operatorname{erfc}(\xi r) \\ & - 2 \left( \frac{3}{4r} - \frac{3a^2}{2r^3} \right) \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} + \left( -16\xi^7 a^2 r^3 - 6\xi^3 r + 32\xi^5 a^2 r + \frac{6\xi a^2}{r^3} \right) \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \quad (3.18) \\ & - 2 \left( -4\xi^7 a^2 r^4 - 3\xi^3 r^2 + 16\xi^5 a^2 r^2 + \frac{3}{2}\xi - 2\xi^3 a^2 - \frac{3\xi a^2}{r^2} \right) \xi^2 r \cdot \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \end{aligned}$$

Im Gegensatz zu  $T_1(r)$  konvergiert die Funktion  $T_2(r)$  für  $r \rightarrow \infty$  von unten gegen 0. Aus diesem Grund soll die Ableitung nach unten abgeschätzt werden. Aufgrund der Gl. (3.13) wird die komplementäre Fehlerfunktion durch die Exponentialfunktion ersetzt, und man erhält folgende Approximation:

$$\begin{aligned} \frac{\partial T_2}{\partial r} \geq & \left( -\frac{3}{4r^2} - \frac{9a^2}{2r^4} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}\xi r} e^{-\xi^2 r^2} \\ & - 2 \left( \frac{3}{4r} - \frac{3a^2}{2r^3} \right) \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} + \left( -16\xi^7 a^2 r^3 - 6\xi^3 r + 32\xi^5 a^2 r + \frac{6\xi a^2}{r^3} \right) \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \\ & - 2 \left( -4\xi^7 a^2 r^4 - 3\xi^3 r^2 + 16\xi^5 a^2 r^2 + \frac{3}{2}\xi - 2\xi^3 a^2 - \frac{3\xi a^2}{r^2} \right) \xi^2 r \cdot \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} := D_{T_2}^*(r) \quad (3.19) \end{aligned}$$

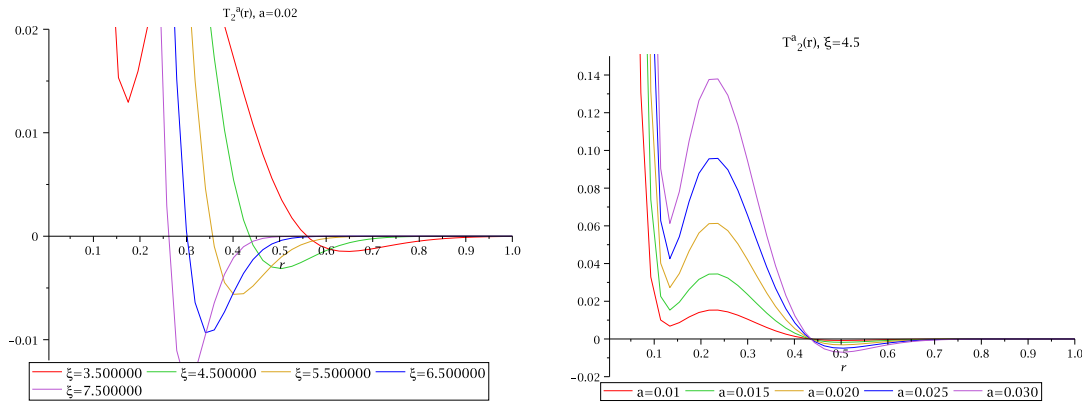
Zerlegung in zwei Teile mit und ohne Teilchenradius  $a$  ergibt:

$$\begin{aligned}
 D_{T_2}^*(r) &= \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{3}{4\xi r^3} - \frac{3\xi}{2r} - 9\xi^3 r + 6\xi^5 r^3 \right) \\
 &\quad + \frac{e^{-\xi^2 r^2}}{\sqrt{\pi}} \cdot a^2 \left( -\frac{9}{2\xi r^5} + \frac{9\xi}{r^3} - 48\xi^7 r^3 + 36\xi^5 r + 8\xi^9 r^5 + \frac{6\xi^3}{r} \right) \\
 &= D_{T_2}^{*(O)}(r) + D_{T_2}^{*(A)}(r)
 \end{aligned} \tag{3.20}$$

Die größte positive reelle Nullstelle der Funktion  $D_{T_2}^{*(O)}(r)$  ist

$$r_2^o \approx \frac{1,3}{\xi}. \tag{3.21}$$

Die Extrempunkte der Funktion  $T_2(r)$  haben die gleiche Abhängigkeit von den Parametern



**Abbildung 3.3:** Funktion  $T_2(r)$  nur mit  $a$ -Termen bei unterschiedlichen Parametern

tern wie die der  $T_1(r)$  (vgl. Abb. 3.3). Die größte positive reelle Nullstelle der Funktion  $D_{T_2}^{*(A)}(r)$  liegt bei

$$r_2^a \approx \frac{2,25316587}{\xi}. \tag{3.22}$$

und ist damit kleiner als  $r_1^a$  (vgl. (3.17)).

### Gültigkeit der Abschätzung der Extremstelle für die ursprüngliche Funktionen

Es bleibt noch zu untersuchen, ob die Abschätzung der Extremstelle  $r_1^a$  für die ursprüngliche Funktion

$$T_{ges}^N := |T_1(r)| + 3|T_2(r)| \tag{3.23}$$

aus Gl. (3.11) gültig ist, d.h. ob der Wert  $r_1^a$  nicht doch links von der tatsächlichen Extremstelle liegt und man damit die wirkliche untere Schranke für den Cutoff-Radius unterschätzt. Dafür wurde sowohl der exakte Wert  $r_1^a$  als auch der Umgebungswert  $r_1^a + \varepsilon$

mit  $10^{-2} \geq \varepsilon \geq 10^{-8}$  in die Funktion  $T_{ges}^N$  eingesetzt und die Differenz zwischen dem exakten Funktionswert und dem Funktionswert der Umgebung betrachtet. Dabei wurde der Parameter  $a$  in den Grenzen von 0.01 bis 0.5 und der Parameter  $\zeta$  in den Grenzen von 1.5 bis 9.5 variiert. Die Ergebnisse sind durchweg positiv und liegen überwiegend in der Größenordnung des Umgebungsparameters  $\varepsilon$ . Damit ist  $r_1^a$  der kleinste Wert, den der Cutoff-Radius in der Simulation annehmen darf, damit die Fehlerabschätzung für die Nahfeld-Summe anwendbar ist.

### 3.1.2 Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe

Gesucht ist eine Funktion, die eine obere Schranke für Gl. (3.11) darstellt. Sei

$$\mathbf{F}_{max} := \max_{1 \leq i \leq m} \mathbf{F}_i \quad \text{mit} \quad \|\mathbf{F}_{max}\|_1 = \max_{1 \leq i \leq m} \|\mathbf{F}_i\|_1. \quad (3.24)$$

Für Gl. (3.11) gilt dann:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{nah}^* &= \|\mathbf{S}_{i_0 l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^N\|_1 \leq \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot \sum_l \sum_{i=1}^n \{ |T_1(r_{il})| + 3|T_2(r_{il})| \} \\ &= \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot \left[ \sum_{l \atop r_{il} > R_c} \sum_{i=1}^n |T_1(r_{il})| + 3 \sum_{l \atop r_{il} > R_c} \sum_{i=1}^n |T_2(r_{il})| \right] \\ &= \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot \left[ S_A^N + 3 \cdot S_B^N \right] \end{aligned} \quad (3.25)$$

### Abschätzung von $S_A^N$

Zuerst wird der Teil  $S_A^N$  betrachtet. Da die Werte von  $T_1(r)$  für  $r > r_1$  positiv sind (vgl. Kap. 3.1.1), kann man den Betrag weglassen und erhält folgendes:

$$\begin{aligned}
S_A^N &= \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left\{ \left( \frac{3}{4} r_{il}^{-1} + \frac{1}{2} a^2 r_{il}^{-3} \right) \operatorname{erfc}(\xi r_{il}) \right. \\
&\quad \left. + \left( 4\xi^7 a^2 r_{il}^4 + 3\xi^3 r_{il}^2 - 20\xi^5 a^2 r_{il}^2 - \frac{9}{2} \xi + 14\xi^3 a^2 + \xi a^2 r_{il}^{-2} \right) \pi^{-1/2} \exp(-\xi^2 r_{il}^2) \right\} \\
&\stackrel{n.(3.13)}{\leq} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left\{ \left( \frac{3}{4} r_{il}^{-1} + \frac{1}{2} a^2 r_{il}^{-3} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi} \xi r_{il}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \right. \\
&\quad \left. + \left( 4\xi^7 a^2 r_{il}^4 + 3\xi^3 r_{il}^2 - 20\xi^5 a^2 r_{il}^2 - \frac{9}{2} \xi + 14\xi^3 a^2 + \xi a^2 r_{il}^{-2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \right\} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} \left( \frac{3}{4\xi r_{il}^2} + \frac{1}{2\xi r_{il}^4} a^2 - \frac{9}{2} \xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{r_{il}^2} \right) \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} (3\xi^3 r_{il}^2 - 20\xi^5 a^2 r_{il}^2) \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} (4\xi^7 a^2 r_{il}^4) \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} + \frac{1}{2\xi R_c^4} a^2 - \frac{9}{2} \xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{R_c^2} \right) \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (3\xi^3 - 20\xi^5 a^2) \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n r_{il}^2 \cdot e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} 4\xi^7 a^2 \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n r_{il}^4 \cdot e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} + \frac{1}{2\xi R_c^4} a^2 - \frac{9}{2} \xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{R_c^2} \right) \cdot S_1^N \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (3\xi^3 - 20\xi^5 a^2) \cdot S_2^N \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} 4\xi^7 a^2 \cdot S_3^N
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Um die Doppelsummen  $S_1^N, S_2^N, S_3^N$  abschätzen zu können, werden zuerst folgende grundlegende Überlegungen durchgeführt:

In einem dreidimensionalen System wird durch den Cutoff-Radius  $R_c$  um jedes Teilchen der Zentralbox eine Kugel gelegt, die ihren Mittelpunkt an der Teilchen-Position  $\mathbf{R}_{i_0 l_0}$  und

den Radius  $R_c$  hat. Das Volumen außerhalb dieser Kugel kann als Kugelschale mit dem Innenradius  $r_{innen} = R_c$  und dem Außenradius  $r_{ausseu} = \infty$  aufgefasst werden. Diese Kugelschale kann man in beliebig viele Kugelschalen mit der jeweiligen Radiendifferenz  $h$  aufteilen. Ausgehend von der Gleichverteilung der Teilchen kann die Teilchenanzahl, die innerhalb einer bestimmten Kugelschale zu erwarten ist, folgendermaßen angenommen werden:

$$N_V \approx \rho \cdot (V_{ausseu} - V_{innen}) \quad (3.27)$$

Dabei sind  $\rho$  die Teilchendichte und  $V_{ausseu}$  und  $V_{innen}$  die Volumina der Außen- und Innenkugel.

Sei

$$m = \frac{R_c}{h} \quad (3.28)$$

die Anzahl der Aufteilungen, die in der Kugel mit dem Radius  $R_c$  um das zu betrachtende Teilchen vorgenommen werden. Die Summen  $S_1^N$ ,  $S_2^N$  und  $S_3^N$  können dann wie folgt dargestellt werden:

$$\begin{aligned} S_*^N &:= \sum_{\substack{l \\ r_{il} > R_c}} \sum_{i=1}^n f(r_{il}) = \sum_{k=m}^{\infty} \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{i=1}^n f(r_{il}) \\ &\quad kh < r_{il} \leq (k+1)h \\ &\leq \sum_{k=m}^{\infty} (V_{k+1} - V_k) \rho \cdot f(r_{il}) \\ &\quad kh < r_{il} \leq (k+1)h \\ &= \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} ((k+1) \cdot h)^3 - (kh)^3 \cdot f(r_{il}) \\ &\quad kh < r_{il} \leq (k+1)h \\ &= \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3k^2 h^3 + 3kh^3 + h^3) f(r_{il}) \\ &\quad kh < r_{il} \leq (k+1)h \end{aligned} \quad (3.29)$$

mit  $V_{k+1}$  als Außenvolumen und  $V_k$  Innenvolumen der  $(k+1)$ -ten Kugelschale.  $f(r_{il})$  ist der Summand der jeweiligen Summe und  $\rho$  ist die mittlere Teilchendichte.

Sei  $r_k := k \cdot h$ . Weil die Funktion  $f(r_{il})$  bei allen drei Summen monoton fallend ist, kann für die Summenabschätzung das Integralvergleichskriterium verwendet werden. Um weiterhin eine möglichst exakte Näherung zu erhalten, wird der Fall für  $h \rightarrow 0$  betrachtet. Es gilt folgendes:

$$\begin{aligned} S_*^N &= \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3r_k^2 h + 3r_k h^2 + h^3) f(r_{il}) \\ &\quad kh < r_{il} \leq (k+1)h \\ &\stackrel{h \rightarrow 0}{\leq} \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \int_{R_c}^{\infty} 3r^2 f(r) dr \\ &= 4\pi \cdot \rho \int_{R_c}^{\infty} r^2 f(r) dr \end{aligned} \quad (3.30)$$

Im letzten Schritt findet der Grenzübergang zu infinitesimal dünnen Kugelschalen und damit die Linearisierung der Gleichung statt.

Zuerst wird die Summe  $S_1^N$  betrachtet.

$$\begin{aligned}
 S_1^N &\stackrel{n.(3.29)}{\leq} \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3k^2h^3 + 3kh^3 + h^3) e^{-\xi^2 k^2 h^2} \\
 &\stackrel{n.(3.30)}{\leq} 4\pi \cdot \rho \int_{R_c}^{\infty} r^2 e^{-\xi^2 r^2} dr
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

Für den Wert des Integrals gilt:

$$\begin{aligned}
 I_1 &:= \int_{R_c}^{\infty} r^2 \cdot e^{-\xi^2 r^2} dr = -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \int_{R_c}^{\infty} e^{-\xi^2 r^2} dr \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left[ \frac{1}{\xi} \int_{\xi R_c}^{\infty} e^{-t^2} dt \right] \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{2\xi} \operatorname{erfc}(\xi R_c) \right] \\
 &\stackrel{n.(3.13)}{\leq} -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{2\xi} \cdot \frac{1}{\sqrt{\pi} \xi R_c} e^{-\xi^2 R_c^2} \right] \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left[ \frac{1}{2\xi^2 R_c} e^{-\xi^2 R_c^2} \right] \\
 &= \frac{1}{2\xi^4 R_c} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} - \frac{1}{2\xi^2 R_c} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \cdot (-R_c^2) \\
 &= e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

Damit gilt für  $S_1^N$  folgendes:

$$S_1^N \leq 4\pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \tag{3.33}$$

Für die Abschätzung der Summe  $S_2^N$  wird das Ergebnis der Gl. (3.29) mit einer anderen Funktion verwendet. Dabei gilt für den Abstand  $r_{il}^2$  folgendes:

$$r_{il}^2 \leq (k+1)^2 h^2$$

Eingesetzt in  $S_2^N$ , erhält man folgendes:

$$\begin{aligned}
 S_2^N &\leq \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3k^2h^3 + 3kh^3 + h^3) (k+1)^2 h^2 e^{-\xi^2 k^2 h^2} \\
 &= \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3k^4h^5 + 9k^3h^5 + 10k^2h^5 + 5kh^5 + h^5) e^{-\xi^2 k^2 h^2} \\
 &= \frac{4}{3} \pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3r_k^4h + 9r_k^3h^2 + 10r_k^2h^3 + 5r_kh^4 + h^5) e^{-\xi^2 r_k^2} \\
 &\stackrel{n.(3.30)}{\leq} 4\pi \cdot \rho \int_{R_c}^{\infty} r^4 e^{-\xi^2 r^2} dr
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

Der Wert des Integrals ist:

$$\begin{aligned}
 I_2 &:= \int_{R_c}^{\infty} r^4 \cdot e^{-\xi^2 r^2} dr = -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \int_{R_c}^{\infty} r^2 \cdot e^{-\xi^2 r^2} dr \\
 &\stackrel{n.(3.35)}{\leq} -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left[ e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \right] \\
 &= e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

Damit ist die Abschätzung der Summe  $S_2^N$  wie folgt:

$$S_2^N \leq 4\pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \tag{3.36}$$

Die Abschätzung der Summe  $S_3^N$  erfolgt analog:

$$\begin{aligned}
 S_3^N &\leq \frac{4}{3}\pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} (3k^2 h^3 + 3kh^3 + h^3) (k+1)^4 h^4 e^{-\xi^2 k^2 h^2} \\
 &= \frac{4}{3}\pi \cdot \rho \sum_{k=m}^{\infty} \left( 3r_k^6 h + 15r_k^5 h^2 + 31r_k^4 h^3 + 34r_k^3 h^4 + 21r_k^2 h^5 + 7r_k h^6 + h^7 \right) e^{-\xi^2 k^2 h^2} \\
 &\stackrel{n.(3.30)}{\leq} 4\pi \cdot \rho \int_{R_c}^{\infty} r^6 e^{-\xi^2 r^2} dr
 \end{aligned} \tag{3.37}$$

Für den Wert des Integrals gilt:

$$\begin{aligned}
 I_3 &:= \int_{R_c}^{\infty} k^6 e^{-\xi^2 k^2} dr = -\frac{\partial}{\partial \xi^2} I_2 \\
 &= -\frac{\partial}{\partial \xi^2} \left( \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) e^{-\xi^2 R_c^2} \right) \\
 &= e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{3}{R_c \xi^8} + \frac{3R_c}{\xi^6} + \frac{3R_c^3}{2\xi^4} + \frac{R_c^5}{2\xi^2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.38}$$

Damit ergibt sich folgende Abschätzung für  $S_3^N$ :

$$S_3^N \leq 4\pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{3}{R_c \xi^8} + \frac{3R_c}{\xi^6} + \frac{3R_c^3}{2\xi^4} + \frac{R_c^5}{2\xi^2} \right) \tag{3.39}$$

Die Gesamtaberschätzung für  $S_A^N$  ist folgende:

$$\begin{aligned}
 S_A^N &\leq 4\pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left[ \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} + \frac{1}{2\xi R_c^4} a^2 - \frac{9}{2}\xi + 14\xi^3 a^2 + \frac{\xi a^2}{R_c^2} \right) \cdot \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \right. \\
 &\quad + (3\xi^3 - 20\xi^5 a^2) \cdot \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \\
 &\quad \left. + 4\xi^7 a^2 \cdot \left( \frac{3}{R_c \xi^8} + \frac{3R_c}{\xi^6} + \frac{3R_c^3}{2\xi^4} + \frac{R_c^5}{2\xi^2} \right) \right] \\
 &= 4\pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left[ \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{9}{8\xi^3 R_c} + \frac{a^2}{4\xi^5 R_c^5} + \frac{3a^2}{4\xi^3 R_c^3} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{3R_c}{4\xi} - \frac{a^2}{2\xi R_c} - \xi a^2 R_c + \frac{3}{2}\xi R_c^3 - 4\xi^3 a^2 R_c^3 + 2\xi^5 a^2 R_c^5 \right]
 \end{aligned} \tag{3.40}$$



### Abschätzung von $S_B^N$

Die Untersuchung des zweiten Teils  $S_B^N$  erfolgt analog. Da aber die Funktion  $T_2(r)$  im Bereich  $r > r_1^a$  (vgl. Kap. 3.1.1) monoton steigend gegen 0 ist, d.h. ihr Wertebereich negativ ist, wird sie im folgenden nicht nach oben, sondern nach unten abgeschätzt.

$$\begin{aligned}
S_B^N &= \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left| \left( \frac{3}{4} r_{il}^{-1} - \frac{3}{2} a^2 r_{il}^{-3} \right) \operatorname{erfc}(\xi r_{il}) \right. \\
&\quad \left. + \left( -4\xi^7 a^2 r_{il}^4 - 3\xi^3 r_{il}^2 + 16\xi^5 a^2 r_{il}^2 + \frac{3}{2} \xi - 2\xi^3 a^2 - 3\xi a^2 r_{il}^{-2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \right| \\
&\stackrel{n.(3.13)}{\leq} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left| \left( \frac{3}{4} r_{il}^{-1} - \frac{3}{2} a^2 r_{il}^{-3} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi} \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \right. \\
&\quad \left. + \left( -4\xi^7 a^2 r_{il}^4 - 3\xi^3 r_{il}^2 + 16\xi^5 a^2 r_{il}^2 + \frac{3}{2} \xi - 2\xi^3 a^2 - 3\xi a^2 r_{il}^{-2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \right| \\
&= \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left( -\frac{3}{4} r_{il}^{-1} + \frac{3}{2} a^2 r_{il}^{-3} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi} \left( \xi r + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \left( 4\xi^7 a^2 r_{il}^4 + 3\xi^3 r_{il}^2 - 16\xi^5 a^2 r_{il}^2 - \frac{3}{2} \xi + 2\xi^3 a^2 + 3\xi a^2 r_{il}^{-2} \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \left( -\frac{3}{4R_c} + \frac{3}{2R_c^3} a^2 \right) \cdot \frac{1}{\left( \xi R_c + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} + 2\xi^3 a^2 - \frac{3}{2} \xi + \frac{3\xi a^2}{R_c^2} \right) \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (3\xi^3 - 16\xi^5 a^2) \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n r_{il}^2 e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} 4\xi^7 a^2 \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n r_{il}^4 e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \left( -\frac{3}{4R_c} + \frac{3}{2R_c^3} a^2 \right) \cdot \frac{1}{\left( \xi R_c + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} + 2\xi^3 a^2 - \frac{3}{2} \xi + \frac{3\xi a^2}{R_c^2} \right) \cdot S_1^N \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} (3\xi^3 - 16\xi^5 a^2) \cdot S_2^N \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} 4\xi^7 a^2 \cdot S_3^N
\end{aligned} \tag{3.41}$$

Setzt man die Ergebnisse (3.33), (3.36), (3.39) ein, erhält man folgende Abschätzung für  $S_B^N$ :

$$\begin{aligned}
S_B^N &\leq 4\pi \cdot \rho \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left[ \left( \left( -\frac{3}{4R_c} + \frac{3}{2R_c^3} a^2 \right) \cdot \frac{1}{\left( \xi R_c + \sqrt{\frac{1}{2}} \right)} - \frac{3}{2} \xi + 2\xi^3 a^2 + \frac{3\xi a^2}{R_c^2} \right) \right. \\
&\quad \cdot \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \\
&\quad + (3\xi^3 - 16\xi^5 a^2) \cdot \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \\
&\quad \left. + 4\xi^7 a^2 \cdot \left( \frac{3}{R_c \xi^8} + \frac{3R_c}{\xi^6} + \frac{3R_c^3}{2\xi^4} + \frac{R_c^5}{2\xi^2} \right) \right] \\
&= 4\pi \cdot \rho \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left[ \frac{3a^2}{4\xi^4 R_c^4 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} + \frac{3a^2}{4\xi^2 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} \right. \\
&\quad - \frac{3}{8\xi^4 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} - \frac{3}{8\xi^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} + \frac{9}{4\xi^3 R_c} + \frac{9R_c}{4\xi} \\
&\quad \left. - \frac{3a^2}{2\xi R_c} - 3\xi a^2 R_c + \frac{3a^2}{2\xi^3 R_c^3} + \frac{3}{2} \xi R_c^3 - 2\xi^3 a^2 R_c^3 + 2\xi^5 a^2 R_c^5 \right]
\end{aligned} \tag{3.42}$$

### Gesamtergebnis für die Nahfeld-Summe

Setzt man die Ergebnisse (3.40) und (3.42) in (3.25) ein, erhält man das Gesamtergebnis für die Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe. Da  $F_{max}$  eine Systemgröße ist und Systemgrößen nicht analytisch bestimmbar sind, wird der ganze Ausdruck auf  $\|F_{max}\|_1$

normiert:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{nah} &:= \frac{\varepsilon_{nah}^*}{\|\mathbf{F}_{max}\|_1} \leq \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot 4\pi \cdot \rho \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left\{ \left( \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{9}{8\xi^3 R_c} + \frac{a^2}{4\xi^5 R_c^5} + \frac{3a^2}{4\xi^3 R_c^3} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{3R_c}{4\xi} - \frac{a^2}{2\xi R_c} - \xi a^2 R_c + \frac{3}{2}\xi R_c^3 - 4\xi^3 a^2 R_c^3 + 2\xi^5 a^2 R_c^5 \right) \right. \\
&\quad \left. + 3 \cdot \left( \frac{3a^2}{4\xi^4 R_c^4 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} + \frac{3a^2}{4\xi^2 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{3}{8\xi^4 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} - \frac{3}{8\xi^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} + \frac{9}{4\xi^3 R_c} + \frac{9R_c}{4\xi} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - \frac{3a^2}{2\xi R_c} - 3\xi a^2 R_c + \frac{3a^2}{2\xi^3 R_c^3} + \frac{3}{2}\xi R_c^3 - 2\xi^3 a^2 R_c^3 + 2\xi^5 a^2 R_c^5 \right) \right\} \\
&= \frac{2}{3\eta a} \cdot \rho \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left\{ \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{63}{8\xi^3 R_c} + \frac{a^2}{4\xi^5 R_c^5} + \frac{21a^2}{4\xi^3 R_c^3} + \frac{15R_c}{2\xi} \right. \\
&\quad \left. - \frac{5a^2}{\xi R_c} - 10\xi a^2 R_c + 6\xi R_c^3 - 10\xi^3 a^2 R_c^3 + 8\xi^5 a^2 R_c^5 \right. \\
&\quad \left. + \frac{9a^2}{4\xi^4 R_c^4 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} + \frac{9a^2}{4\xi^2 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} \right. \\
&\quad \left. - \frac{9}{8\xi^4 R_c^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} - \frac{9}{8\xi^2 \left( \xi R_c + \frac{1}{\sqrt{2}} \right)} \right\}
\end{aligned} \tag{3.43}$$

Damit bleibt der Einfluss der Kraft auf die Geschwindigkeit erhalten und gleichzeitig hat man ein systemunabhängiges Ergebnis.  $\varepsilon_{nah}$  ist der gesuchte Fehler aus Gl. (3.2), der durch die Einführung des Cutoff-Radius entsteht. Er ist nach oben beschränkt und fällt exponentiell mit wachsendem Cutoff-Radius ab. Außerdem ist er von der Teilchendichte  $\rho$  abhängig.

## 3.2 Allgemeine Fehlerberechnung der Fernfeld-Summe

Möchte man den Fehler für den Fernfeld-Anteil der Ewald-Summation abschätzen, muss man die Summen über den Term  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda)$  aus der Gleichung (2.20) untersuchen. Dabei kann man viele Ergebnisse aus dem vorigen Kapitel übernehmen. Sei also im folgenden

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_{i_0}^F &:= \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \quad \text{mit} \\
\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}) &= \left( \mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}} \right) \left( 1 - \frac{1}{3}a^2 k^2 \right) \left( 1 + \frac{1}{4}\xi^{-2}k^2 + \frac{1}{8}\xi^{-4}k^4 \right) 6\pi k^{-2} \exp\left( -\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2 \right)
\end{aligned} \tag{3.44}$$

die exakte Lösung des Fernfeld-Anteils.  $\tilde{\mathbf{S}}_{i_0}^F$  sei die Lösungsnaherung, die durch das Einführen des Parameters  $K_{max}$  entsteht. Der Fehler  $\varepsilon_{fern}^*$  wird analog zum vorigen Kapitel als Betragssummennorm des Abstandvektors zwischen der exakten Lösung  $\mathbf{S}_{i_0}^F$  und der Näherung  $\tilde{\mathbf{S}}_{i_0}^F$  definiert:

$$\varepsilon_{fern}^* := \|\mathbf{S}_{i_0 l_0}^F - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^F\|_1 \quad (3.45)$$

Für die Differenz  $\mathbf{S}_{i_0 l_0}^F - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^F$  gilt

$$\begin{aligned} 6\pi\eta a \cdot (\mathbf{S}_{i_0 l_0}^F - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^F) &= V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \\ &\quad - V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \leq K_{max}}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \\ &= V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} \sum_{i=1}^n \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \\ &= V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} \sum_{i=1}^n (\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) T_3(k_\lambda) \cdot \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \end{aligned} \quad (3.46)$$

mit

$$T_3(k_\lambda) = \left(1 - \frac{1}{3}a^2k^2\right) \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{4}\xi^{-2} + \frac{1}{8}\xi^{-4}k^2\right) 6\pi \exp\left(-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2\right) \quad (3.47)$$

Ihre Norm kann man folgendermaßen nach der Dreiecksungleichung und den Eigenschaften der cos-Funktion abschätzen:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{fern}^* &\leq \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_c}} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\|_1 |T_3(k_\lambda)| \cdot \|\mathbf{F}_i\|_1 \cdot |\cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\}| \\ &\leq \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot V^{-1} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_c}} \sum_{i=1}^n \|\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\|_1 |T_3(k_\lambda)| \cdot \|\mathbf{F}_i\|_1 \end{aligned} \quad (3.48)$$

Die Matrix  $\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}$  ist die Projektor-Matrix, deren Elemente alle betragsmäßig kleiner 1 sind. Für die Elemente der Differenzmatrix  $(\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}})$  gilt also Gl. (3.9) und ihre Norm kann man analog zur Gl. (3.10) durch

$$\|\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |a_{ij}| < \max_{1 \leq j \leq 3} \sum_{i=1}^3 |1| = 3 \quad (3.49)$$

beschränken. Damit gilt für den Fernfeld-Fehler folgende Schranke:

$$\begin{aligned}
 6\pi\eta a \cdot \varepsilon_{fern}^* &\leq 3 \cdot V^{-1} \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} \sum_{i=1}^n |T_3(k_\lambda)| \\
 &= 3 \cdot V^{-1} \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} \rho \cdot V \cdot |T_3(k_\lambda)| \\
 &= 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} |T_3(k_\lambda)|,
 \end{aligned} \tag{3.50}$$

wobei  $\rho$  die mittlere Teilchendichte ist und  $\mathbf{F}_{max}$  wie in Gl. (3.24) definiert ist.

### 3.2.1 Bestimmung der Extremstellen

Ähnlich wie im vorigen Kapitel stellt sich die Frage, wie klein der Parameter  $K_{max}$  sein darf, d.h. ab welchem Mindestwert sich der Approximationsfehler dadurch verbessern lässt, dass die Anzahl der Summanden erhöht wird. Die Funktion  $T_3(k)$  befindet sich nur solange im positiven Wertebereich, wie die folgende Ungleichung gilt:

$$1 - \frac{1}{3}a^2k^2 > 0 \quad \Leftrightarrow \quad k < \frac{\sqrt{3}}{a} \tag{3.51}$$

Sobald dieser Wert überschritten wird, wird die Funktion negativ. Durch den Exponentialfaktor konvergiert sie zwar für  $k \rightarrow \infty$  monoton steigend gegen 0, allerdings weist sie ein Minimum im negativen Wertebereich auf, das analytisch nicht bestimmbar ist.

Betrachtet man aber nur einen Teil der Funktion  $T_3(k)$ , nämlich

$$T_3(k) > T_3^{neg}(k) := -\frac{1}{3}a^2k^2 \left( \frac{1}{k^2} + \frac{1}{4}\xi^{-2} + \frac{1}{8}\xi^{-4}k^2 \right) 6\pi \exp\left(-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2\right), \tag{3.52}$$

kann das Minimum davon analytisch bestimmt werden. Die erste Ableitung der Funktion  $T_3^{neg}(k)$  ist

$$\frac{\partial T_3^*(k)}{\partial k} = \pi \cdot e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2} \left( -\frac{3k^3a^2}{4\xi^4} + \frac{k^5a^2}{8\xi^6} \right). \tag{3.53}$$

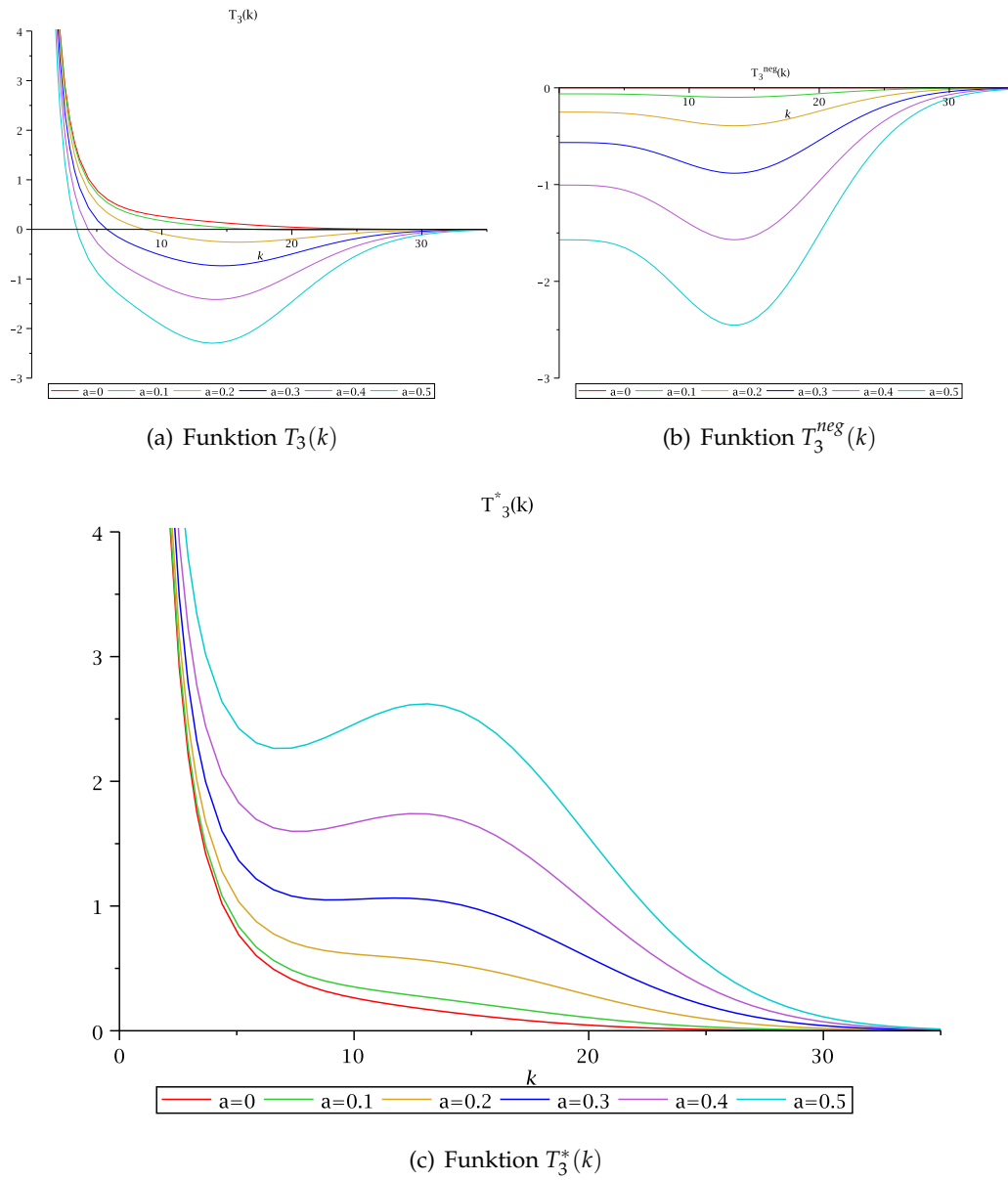
Ihre einzige positive Nullstelle liegt bei

$$k_1 = \sqrt{6}\xi \tag{3.54}$$

Das Einsetzen in die zweite Ableitung zeigt, dass an dieser Stelle tatsächlich ein Minimum vorliegt.

### Gültigkeit der Abschätzung für die Extremstelle

Wie bereits bei der Ermittlung der Extremstellen für die Nahfeld-Summe musste hier auch die Gültigkeit der Abschätzung überprüft werden. Dafür wurde der Wert der Funktion (3.47) an der ermittelten Extremstelle  $k_1$  genommen und mit den Funktionswerten



**Abbildung 3.4:** Die Funktion  $T_3(k)$  und ihre Approximationen für unterschiedliche Teilchen-Radien beim  $\xi = 5.5$

für unterschiedliche Parameter an der Stelle  $k_1 + \varepsilon$  mit  $10^{-2} \geq \varepsilon \geq 10^{-8}$  verglichen. Die Parameter  $a$  und  $\zeta$  variierten in den gleichen Grenzen wie im Kap. 3.1.1. Die Differenzen zwischen dem exakten Wert und dem Funktionswert weiter rechts waren alle positiv. Daraus wurde die Gültigkeit der Abschätzung geschlossen. Die Stelle  $k_1$  aus (3.54) kann also als untere Schranke für den Parameter  $K_{max}$  benutzt werden (Abb. 3.4), und die folgende Fehlerabschätzung gilt für alle  $K_{max}$ -Werte größer  $k_1$ .

### 3.2.2 Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe

Gesucht ist eine Funktion, die den Fehler, definiert in Gl. (3.50), nach oben beschränkt. Dabei muss man aber beachten, dass unterhalb eines gewissen Teilchenradius  $a$  die Funktion  $T_3(k)$  erst dann negativ wird, wenn der Exponentialfaktor bereits kleiner ist als Maschinen-Genauigkeit (vgl. Gl. (3.51)). Um im folgenden aus Gl. (3.50) den Betrag trotzdem eliminieren zu können, wird die Funktion  $T_3(k)$  durch eine andere Funktion  $T_3^*(k)$ , definiert als

$$T_3^*(k) := \left(1 + \frac{1}{3}a^2k^2\right) \left(\frac{1}{k^2} + \frac{1}{4}\zeta^{-2} + \frac{1}{8}\zeta^{-4}k^2\right) 6\pi \exp\left(-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k^2\right) > |T_3(k)| \quad (3.55)$$

nach oben abgeschätzt. Die Funktion  $T_3^*(k)$  weist ihr Maximum an der gleichen Stelle auf, an der das Minimum der ursprünglichen Funktion liegt, und fällt danach monoton gegen 0 (s. Abb. (3.4)). Da sie für alle  $k$ -Werte positiv ist, kann man den Betrag weglassen

und erhält:

$$\begin{aligned}
6\pi\eta a \cdot \varepsilon_{fern}^* &\leq 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \sum_{k_\lambda > K_{max}} \left(1 + \frac{1}{3}a^2 k_\lambda^2\right) \left(\frac{1}{k_\lambda^2} + \frac{1}{4}\zeta^{-2} + \frac{1}{8}\zeta^{-4}k_\lambda^2\right) 6\pi e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \\
&= 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \sum_{k_\lambda > K_{max}} \left(\frac{1}{k_\lambda^2} + \frac{1}{4\zeta^2} + \frac{1}{8\zeta^4}k_\lambda^2\right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{3}a^2 + \frac{a^2}{12\zeta^2}k_\lambda^2 + \frac{a^2}{24\zeta^4}k_\lambda^4\right) 6\pi e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \\
&\leq 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot 6\pi \left[ \left(\frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} + \frac{1}{3}a^2\right) \sum_{k_\lambda > K_{max}} e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{8\zeta^4} + \frac{a^2}{12\zeta^2}\right) \sum_{k_\lambda > K_{max}} k_\lambda^2 \cdot e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \right. \\
&\quad \left. + \frac{a^2}{24\zeta^4} \sum_{k_\lambda > K_{max}} k_\lambda^4 \cdot e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \right] \\
&= 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot 6\pi \left[ \left(\frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} + \frac{1}{3}a^2\right) \cdot S_1^F \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{8\zeta^4} + \frac{a^2}{12\zeta^2}\right) \cdot S_2^F \right. \\
&\quad \left. + \frac{a^2}{24\zeta^4} \cdot S_3^F \right]
\end{aligned} \tag{3.56}$$

Für die Abschätzung der Summen  $S_1^N$ ,  $S_2^N$  und  $S_3^N$  wird hier der gleiche Ansatz genommen wie im Kap. 3.1.2: Um das zu betrachtende Teilchen wird eine Kugelschale gelegt, die ihren Mittelpunkt an der Teilchenposition und den Innenradius  $K_{max}$  hat. Auch hier ist der Außenradius unendlich groß und die gesamte Kugelschale wird im nächsten Schritt in unendlich viele infinitesimal dünne Schichten unterteilt, in denen die Anzahl der Summanden ausgehend von der Gleichverteilung der Teilchen geschätzt wird. Für die Anzahl der Teilchen innerhalb einer Kugel im reziproken Raum gilt:

$$N_K = \frac{4\pi K_{max}^3}{3} \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} \tag{3.57}$$

Dabei ist  $2\pi/L$  die Anzahl der Inkremente des Vektors  $\mathbf{k}_\lambda$ .

Sei

$$p := \frac{K_{max}}{h} \tag{3.58}$$



die Anzahl der Schichten der Kugel mit dem Radius  $K_{max}$ . Für alle drei Summen gilt folgendes:

$$\begin{aligned}
 S_*^F &:= \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} f(k_\lambda) = \sum_{q=p}^{\infty} \sum_{qh < k_\lambda \leq (q+1)h} f(k_\lambda) \\
 &= \sum_{q=p}^{\infty} (N_{q+1} - N_q) \cdot f(k_\lambda) \\
 &= \sum_{q=p}^{\infty} \frac{L^3 \cdot ((q+1)h)^3 - L^3(qh)^3}{6\pi^2} \cdot f(k_\lambda) \quad (3.59) \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3q^2h^3 + 3qh^3 + h^3) \cdot f(k_\lambda) \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3kh + 3kh^2 + h^3) \cdot f(k_\lambda)
 \end{aligned}$$

$N_{q+1}$  und  $N_q$  sind die Teilchenanzahlen der Außen- und Innenkugel,  $f(k_\lambda)$  die Funktion in der jeweiligen Summe und  $L$  die Länge der Box.  $k$  ist definiert als  $k_q := q \cdot h$ .

Weil die Funktion  $f(k_\lambda)$  auch hier bei allen Summen monoton fallend ist, kann die Abschätzung analog zum Ergebnis (3.30) vorgenommen werden. Für  $h \rightarrow 0$  erhält man folgendes Ergebnis:

$$S_*^F \leq \frac{L^3}{6\pi^2} \int_{K_{max}}^{\infty} k^2 f(k) dk \quad (3.60)$$

Für die Summe  $S_1^F$  gilt:

$$\begin{aligned}
 S_1^F &\stackrel{n.(3.59)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3q^2h^3 + 3qh^3 + h^3) \cdot e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \\
 &\stackrel{n.(3.60)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \int_{K_{max}}^{\infty} k^2 e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2} dk \quad (3.61)
 \end{aligned}$$

Die Summe  $S_2^F$  sieht folgendermaßen aus:

$$\begin{aligned}
 S_2^F &\stackrel{n.(3.59)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3q^2h^3 + 3qh^3 + h^3) \cdot (q+1)^2 h^2 e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3q^4h^5 + 9q^3h^5 + 10q^2h^5 + 5qh^5 + h^5) e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3k_q^4h + 9k_q^3h^2 + 10k_q^2h^3 + 5k_qh^4 + h^5) e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \\
 &\stackrel{n.(3.60)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \int_{K_{max}}^{\infty} k^4 e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2} dk \quad (3.62)
 \end{aligned}$$

Für die Summe  $S_3^F$  gilt analog:

$$\begin{aligned}
 S_3^F &\stackrel{n.(3.59)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} (3q^2h^3 + 3qh^3 + h^3) \cdot (q+1)^4 h^4 e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \sum_{q=p}^{\infty} \left( 3k_q^6h + 15k_q^5h^2 + 31k_q^4h^3 + 34k_q^3h^4 + 21k_q^2h^5 + 7k_qh^6 + h^7 \right) e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}q^2h^2} \quad (3.63) \\
 &\stackrel{n.(3.60)}{\leq} \frac{L^3}{6\pi^2} \int_{K_{max}}^{\infty} k^6 e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2} dk
 \end{aligned}$$

Sei  $\alpha := \frac{1}{2\xi}$ . Dann ist

$$e^{-\frac{1}{4}\xi^{-2}k^2} = e^{-\alpha^2 k^2}.$$

Damit können für die Integrale die Ergebnisse (3.32), (3.32) und (3.35) eingesetzt werden und man erhält:

$$\begin{aligned}
 S_1^F &\leq \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\alpha^2 K_{max}^2} \left( \frac{1}{2\alpha^4 K_{max}} + \frac{K_{max}}{2\alpha^2} \right) \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\xi^2} K_{max}^2} \left( \frac{8\xi^4}{K_{max}} + 2\xi^2 K_{max} \right) \quad (3.64)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_2^F &\leq \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\alpha^2 K_{max}^2} \left( \frac{1}{\alpha^6 K_{max}} + \frac{K_{max}}{\alpha^4} + \frac{K_{max}^3}{2\alpha^2} \right) \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\xi^2} K_{max}^2} \left( \frac{64\xi^6}{K_{max}} + 16\xi^4 K_{max} + 2\xi^2 K_{max}^3 \right) \quad (3.65)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_2^F &\leq \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\alpha^2 K_{max}^2} \left( \frac{3}{K_{max}\alpha^8} + \frac{3K_{max}}{\alpha^6} + \frac{3K_{max}^3}{2\alpha^4} + \frac{K_{max}^5}{2\alpha^2} \right) \\
 &= \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\xi^2} K_{max}^2} \left( \frac{768\xi^8}{K_{max}} + 192\xi^6 K_{max} + 24\xi^4 K_{max}^3 + 2\xi^2 K_{max}^5 \right) \quad (3.66)
 \end{aligned}$$

Für die gesamte Fernfeld-Abschätzung gilt dann:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{fern}^* &\leq \frac{1}{6\pi\eta a} \cdot 3 \cdot \rho \cdot \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot 6\pi \cdot \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\xi^2} K_{max}^2} \left[ \left( \frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\xi^2} + \frac{1}{3}a^2 \right) \cdot \left( \frac{8\xi^4}{K_{max}} + 2\xi^2 K_{max} \right) \right. \\
 &\quad + \left( \frac{1}{8\xi^4} + \frac{a^2}{12\xi^2} \right) \cdot \left( \frac{64\xi^6}{K_{max}} + 16\xi^4 K_{max} + 2\xi^2 K_{max}^3 \right) \\
 &\quad \left. + \frac{a^2}{24\xi^4} \cdot \left( \frac{768\xi^8}{K_{max}} + 192\xi^6 K_{max} + 24\xi^4 K_{max}^3 + 2\xi^2 K_{max}^5 \right) \right] \\
 &= \frac{\rho \cdot V}{2\pi^2\eta a} \|\mathbf{F}_{max}\|_1 \cdot e^{-\frac{1}{4\xi^2} K_{max}^2} \left( \frac{8\xi^4}{K_{max}^3} + \frac{12\xi^2}{K_{max}} + \frac{5}{2}K_{max} + \frac{40a^2\xi^4}{K_{max}} + 10a^2\xi^2 K_{max} \right. \\
 &\quad \left. + \frac{K_{max}^3}{4\xi^2} + \frac{7}{6}a^2 K_{max}^3 + \frac{a^2 K_{max}^5}{12\xi^2} \right) \quad (3.67)
 \end{aligned}$$

Anschließend wird der Fehler analog zur Gl. (3.43) auf die Kraft normiert, und man erhält das Gesamtergebnis für die Fernfeld-Summe:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{fern} &:= \frac{\varepsilon_{fern}^*}{\|\mathbf{F}_{max}\|_1} = \frac{\|\mathbf{S}_{i_0 l_0}^F - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^F\|_1}{\|\mathbf{F}_{max}\|_1} \\ &\leq \frac{\rho \cdot V}{2\pi^2 \eta a} \cdot e^{-\frac{1}{4\zeta^2} K_{max}^2} \left( \frac{8\zeta^4}{K_{max}^3} + \frac{12\zeta^2}{K_{max}} + \frac{5}{2} K_{max} \right. \\ &\quad \left. + \frac{40a^2 \zeta^4}{K_{max}} + 10a^2 \zeta^2 K_{max} + \frac{K_{max}^3}{4\zeta^2} + \frac{7}{6} a^2 K_{max}^3 + \frac{a^2 K_{max}^5}{12\zeta^2} \right) \end{aligned} \quad (3.68)$$

$\varepsilon_{fern}$  ist der gesuchte Fehler für den Fernfeld-Anteil aus Gl. (3.2) und fällt analog zum Nahfeld-Fehler exponentiell ab.

### 3.3 Fehlerberechnung für Oseen-Tensor

In den bisherigen Kapiteln wurden die allgemeinen Fehler-Abschätzungen für die Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors ermittelt. Ein wichtiger Spezialfall des Rotne-Prager-Tensors ist der Oseen-Tensor (s. Kap. 2.2.1), der die Kopplung zwischen Kraft und Geschwindigkeit für Punktteilchen darstellt. Bei Problemstellungen, in denen die Teilchendichte sehr gering und damit der Teilchenabstand sehr groß ist, wird der Radius eines Teilchens im Verhältnis zum Abstand für die Untersuchung der Wechselwirkungen vernachlässigbar klein. Möchte man also die Flüssigkeits-Geschwindigkeit am Ort eines Teilchens bestimmen, können die anderen Teilchen als Kraft ausübende Punktteilchen betrachtet werden. In diesen Fällen kann dann der Oseen-Tensor eingesetzt werden. Dabei wird in Gl. (2.20) der Parameter  $a$  in allen Termen ausser dem Selbstenergie-Term  $1/6\pi\eta a \cdot \mathbf{F}_{i_0}$  gleich 0 gesetzt. Man erhält also folgende Geschwindigkeits-Gleichung:

$$\begin{aligned} 6\pi\eta \mathbf{S}_{i_0} &= \frac{1}{a} \mathbf{F}_{i_0} + \sum_l \sum_{i=1}^n \mathbf{1} T_1^{(O)}(r_{il}) + \hat{\mathbf{r}} \hat{\mathbf{r}} T_2^{(O)}(r_{il}) \mathbf{F}_i \\ &\quad + \rho \sum_{\lambda} \sum_{i=1}^n (\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}} \hat{\mathbf{k}}) T_3^{(O)}(k) \mathbf{F}_i \cos\{\mathbf{k}_\lambda \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i_0})\} \end{aligned} \quad (3.69)$$

mit  $T_1^{(O)}(r)$ ,  $T_2^{(O)}(r)$  und  $T_3^{(O)}(k)$  definiert als

$$\begin{aligned} T_1^{(O)}(r) &= \left( \frac{3}{4} r^{-1} \right) \operatorname{erfc}(\zeta r) + \left( 3\zeta^3 r^2 - \frac{9}{2} \zeta \right) \pi^{-1/2} \exp(-\zeta^2 r^2) \\ T_2^{(O)}(r) &= \left( \frac{3}{4} r^{-1} \right) \operatorname{erfc}(\zeta r) + \left( -3\zeta^3 r^2 + \frac{3}{2} \zeta \right) \pi^{-1/2} \exp(-\zeta^2 r^2) \\ T_3^{(O)}(k) &= \left( \frac{1}{k^2} + \frac{1}{4} \zeta^{-2} + \frac{1}{8} \zeta^{-4} k^2 \right) 6\pi \exp\left(-\frac{1}{4} \zeta^{-2} k^2\right) \end{aligned} \quad (3.70)$$

Ergänzend werden in diesem Kapitel die Fehlerschranken für Nah- und Fernfeldsumme für den Spezialfall Oseen-Tensor noch ein mal extra aufgeführt.

### 3.3.1 Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe

Der Ausgangspunkt für die Fehlerabschätzung der Nahfeld-Summe ist Gl. (3.11). Zuerst werden die Funktionen mit Hilfe der Gl. (3.13) durch einfachere Funktionen approximiert:

$$\begin{aligned}
 T_1^{(O)}(r) &\leq \left(\frac{3}{4}r^{-1}\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}\xi r} e^{-\xi^2 r^2} + \left(3\xi^3 r^2 - \frac{9}{2}\xi\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r^2} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r^2} \left(\frac{3}{4\xi r^2} + 3\xi^3 r^2 - \frac{9}{2}\xi\right) := T_1^*(r), \\
 T_2^{(O)}(r) &\geq \left(\frac{3}{4}r^{-1}\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}\left(\xi r + \sqrt{\frac{1}{2}}\right)} e^{-\xi^2 r^2} + \left(-3\xi^3 r^2 + \frac{3}{2}\xi\right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r^2} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r^2} \left(\frac{3}{4\xi r^2 + r\sqrt{8}} - 3\xi^3 r^2 + \frac{3}{2}\xi\right) := T_2^*(r)
 \end{aligned} \tag{3.71}$$

Benutzt man für die Fehlerabschätzung diese Näherungen statt der ursprünglichen Terme und die Abschätzung der Kraft (3.24), kann man den eigentlichen Fehler  $\varepsilon_{nah}^{(O)}$  folgendermaßen nach oben abschätzen:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{nah}^{(O)} &:= \frac{\|\mathbf{S}_{i_0 l_0}^N - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^N\|_1}{\|\mathbf{F}_{max}\|_1} \leq \frac{1}{6\pi\eta} \cdot \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \left\{ |T_1^{*(O)}(r_{il})| + 3|T_2^{*(O)}(r_{il})| \right\} \\
 &= \frac{1}{6\pi\eta} \cdot \left[ \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n |T_1^{*(O)}(r_{il})| + 3 \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n |T_2^{*(O)}(r_{il})| \right] \\
 &= \frac{1}{6\pi\eta} \cdot [S_A^N + 3 \cdot S_B^N]
 \end{aligned} \tag{3.72}$$

Aufgrund der Gültigkeit der Abschätzung für die Lage der Extremstelle, die analog zum Verfahren im Kap. 3.1.1 überprüft wurde, gilt diese Fehlerschranke für alle  $r > r_1^0 \approx 1.532382/\xi$  (vgl. Gl. (3.16)).

### Abschätzung von $S_A^N$

Zuerst wird der Teil  $S_A^N$  betrachtet. Da die Werte von  $T_1^*(r_{il})$  positiv sind, wird der Betrag weggelassen und man erhält folgendes:

$$\begin{aligned}
 S_A^N &= \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n T_1^{*(O)}(r_{il}) \leq \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \left( \frac{3}{4\xi r_{il}^2} + 3\xi^3 r_{il}^2 - \frac{9}{2}\xi \right) \\
 &\leq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} - \frac{9}{2}\xi \right) \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} + \frac{3\xi^3}{\sqrt{\pi}} \sum_l \sum_{\substack{i=1 \\ r_{il} > R_c}}^n r_{il}^2 e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
 &\stackrel{n.(3.33), (3.36)}{\leq} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cdot \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} - \frac{9}{2}\xi \right) \cdot 4 \cdot \pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \\
 &\quad + \frac{3\xi^3}{\sqrt{\pi}} 4 \cdot \pi \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \\
 &= \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \cdot \left[ \left( \frac{3}{4\xi R_c^2} - \frac{9}{2}\xi \right) \cdot \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \right. \\
 &\quad \left. + 3\xi^3 \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \right] \\
 &= \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \cdot \left( \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{9}{8\xi^3 R_c} + \frac{3R_c}{4\xi} + \frac{3\xi R_c^3}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

**Abschätzung von  $S_B^N$** 

Analog zur Vorgehensweise im Kap. 3.1.2 wird die Funktion  $T_2^{*(O)}$  nach unten abgeschätzt. Für  $S_B^N$  gilt:

$$\begin{aligned}
S_B^N &= \sum_l \sum_{i=1}^n |T_2^{*(O)}(r_{il})| \leq \sum_l \sum_{i=1}^n \left| \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \left( \frac{3}{4\xi r_{il}^2 + r_{il}\sqrt{8}} - 3\xi^3 r_{il}^2 + \frac{3}{2}\xi \right) \right| \\
&= \sum_l \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2 r_{il}^2} \left( -\frac{3}{4\xi r_{il}^2 + r_{il}\sqrt{8}} + 3\xi^3 r_{il}^2 - \frac{3}{2}\xi \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( -\frac{3}{4\xi R_c^2 + R_c\sqrt{8}} - \frac{3}{2}\xi \right) \sum_l \sum_{i=1}^n e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{\pi}} 3\xi^3 \sum_l \sum_{i=1}^n r_{il}^2 \cdot e^{-\xi^2 r_{il}^2} \\
&\leq \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[ \left( -\frac{3}{4\xi R_c^2 + R_c\sqrt{8}} - \frac{3}{2}\xi \right) \cdot S_1^N + 3\xi^3 \cdot S_2^N \right] \\
&\stackrel{\text{n. (3.33), (3.36)}}{\leq} \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left[ \left( -\frac{3}{4\xi R_c^2 + R_c\sqrt{8}} - \frac{3}{2}\xi \right) \cdot \left( \frac{1}{2\xi^4 R_c} + \frac{R_c}{2\xi^2} \right) \right. \\
&\quad \left. + 3\xi^3 \left( \frac{1}{\xi^6 R_c} + \frac{R_c}{\xi^4} + \frac{R_c^3}{2\xi^2} \right) \right] \\
&= \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \left( -\frac{3}{8\xi^5 R_c^3 + 2\xi^4 R_c^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} - \frac{3}{8\xi^3 R_c + 8\xi^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{\xi^3 R_c} + \frac{3R_c}{\xi} + \frac{3}{2} R_c^3 \xi \right)
\end{aligned} \tag{3.74}$$

### Gesamtergebnis für die Nahfeld-Summe

Setzt man die Ergebnisse (3.73) und (3.74) in (3.72) ein, erhält man folgendes Gesamtergebnis:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{nah}^{(O)} &< \frac{1}{6\pi\eta} \cdot \frac{4\pi}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \cdot \left( \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{9}{8\xi^3 R_c} + \frac{3R_c}{4\xi} + \frac{3\xi R_c^3}{2} \right. \\
 &\quad \left. + 3 \cdot \left( -\frac{3}{8\xi^5 R_c^3 + 2\xi^4 R_c^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} - \frac{3}{8\xi^3 R_c + 8\xi^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + \frac{3}{\xi^3 R_c} + \frac{3R_c}{\xi} + \frac{3}{2} R_c^3 \xi \right) \right) \\
 &= \frac{1}{3\eta} \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot \rho \cdot e^{-\xi^2 R_c^2} \cdot \left( \frac{3}{8\xi^5 R_c^3} + \frac{63}{8\xi^3 R_c} + \frac{15R_c}{2\xi} + 6\xi R_c^3 \right. \\
 &\quad \left. - \frac{9}{8\xi^5 R_c^3 + 2\xi^4 R_c^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} - \frac{9}{8\xi^3 R_c + 8\xi^2 \frac{1}{\sqrt{2}}} \right)
 \end{aligned} \tag{3.75}$$

Damit ist das Ergebnis identisch mit der allgemeinen Fehlerabschätzung für die Nahfeld-Summe (vgl Gl. (3.43)), in der die Terme, die  $a$  enthalten, eliminiert wurden.

### 3.3.2 Fehlerabschätzung der Fernfeld-Summe

Für die Ermittlung der Fehlerschranke für den Fernfeld-Anteil wird die Ausgangsgleichung (3.50) genommen. Statt der ursprünglichen Funktion  $T_3(k)$  wird die Oseen-Form  $T_3^{(O)}(k)$  aus Gl. (3.70) betrachtet. Die Funktion  $T_3^{(O)}(k)$  besitzt keine Extremwerte im positiven Definitionsbereich. Für den Fehler des Fernfeldes, definiert als

$$\varepsilon_{fern}^{(O)} := \frac{\|\mathbf{S}_{i_0 l_0}^F - \tilde{\mathbf{S}}_{i_0 l_0}^F\|_1}{\|\mathbf{F}_{max}\|_1} \tag{3.76}$$

gilt dann:

$$\begin{aligned}
\varepsilon_{fern} &\leq \frac{1}{6\pi\eta} \cdot 18\pi \cdot \rho \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} |T_3^{(O)}(k_\lambda)| \\
&\leq \frac{3}{\eta} \cdot \rho \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} \left| \left( \frac{1}{k_\lambda^2} + \frac{1}{4}\zeta^{-2} + \frac{1}{8}\zeta^{-4}k_\lambda^2 \right) 6\pi e^{-\frac{1}{4}\zeta^{-2}k_\lambda^2} \right| \\
&\leq \frac{3}{\eta} \cdot \rho \cdot \left[ \left( \frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} \right) \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} e^{-\frac{1}{4\zeta^2}k_\lambda} + \frac{1}{8\zeta^4} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda > K_{max}}} k_\lambda^2 e^{-\frac{1}{4\zeta^2}k_\lambda} \right] \\
&\leq \frac{3}{\eta} \cdot \rho \left[ \left( \frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} \right) \cdot S_1^F + \frac{1}{8\zeta^4} \cdot S_2^F \right] \tag{3.77} \\
&\stackrel{n.(3.64),(3.65)}{\leq} \frac{3}{\eta} \cdot \rho \left[ \left( \frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} \right) \cdot \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\zeta^2}K_{max}^2} \left( \frac{8\zeta^4}{K_{max}} + 2\zeta^2 K_{max} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8\zeta^4} \cdot \frac{L^3}{6\pi^2} \cdot e^{-\frac{1}{4\zeta^2}K_{max}^2} \left( \frac{64\zeta^6}{K_{max}} + 16\zeta^4 K_{max} + 2\zeta^2 K_{max}^3 \right) \right] \\
&= \frac{\rho \cdot V}{2\pi^2\eta} e^{-\frac{1}{4\zeta^2}K_{max}^2} \left[ \left( \frac{1}{K_{max}^2} + \frac{1}{4\zeta^2} \right) \cdot \left( \frac{8\zeta^4}{K_{max}} + 2\zeta^2 K_{max} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{8\zeta^4} \cdot \left( \frac{64\zeta^6}{K_{max}} + 16\zeta^4 K_{max} + 2\zeta^2 K_{max}^3 \right) \right] \\
&= \frac{\rho \cdot V}{2\pi^2\eta} e^{-\frac{1}{4\zeta^2}K_{max}^2} \left( \frac{8\zeta^4}{K_{max}^3} + \frac{12\zeta^2}{K_{max}} + \frac{5}{2}K_{max} + \frac{K_{max}^3}{4\zeta^2} \right)
\end{aligned}$$





## 4 Parameteranalyse

Im vorigen Kapitel wurde der Approximationsfehler, der durch das Abschneiden der Summen in Gl. (2.20) entsteht, analytisch bestimmt. Zwar hat das Ergebnis gezeigt, dass der Fehler ab einem bestimmten Punkt mit steigender Anzahl der Summanden exponentiell abfällt, allerdings ist bei einer Computersimulation nicht nur die Güte der Approximationslösung, sondern auch die Laufzeit für die Wahl einer Methode entscheidend.

Bereits im Kapitel 2.2.5 wurde erwähnt, dass die Konvergenz-Geschwindigkeit der beiden Summen vom Parameter  $\xi$  abhängt, der die Breite der Ladungsverstärkungen festlegt. Im Ortsraum, d.h. im Nahfeld-Bereich, erreicht man die schnelle Konvergenz der Summe, wenn  $\xi$  möglichst groß gewählt wird, im reziproken Raum ist aber diese Abhängigkeit umgekehrt und mit steigendem  $\xi$  konvergiert die Fernfeld-Summe schlechter.

Die Frage, die in diesem Kapitel grafisch untersucht wird, ist zum einen, wie die Abschneideparameter  $R_c$  und  $K_{max}$  bei einer vorgegebenen Fehlerschranke gewählt werden müssen, und zum anderen, welcher  $\xi$ -Wert dabei am geeignetsten ist, um die Laufzeit der Nah- und Fernfeld-Summe zu minimieren.

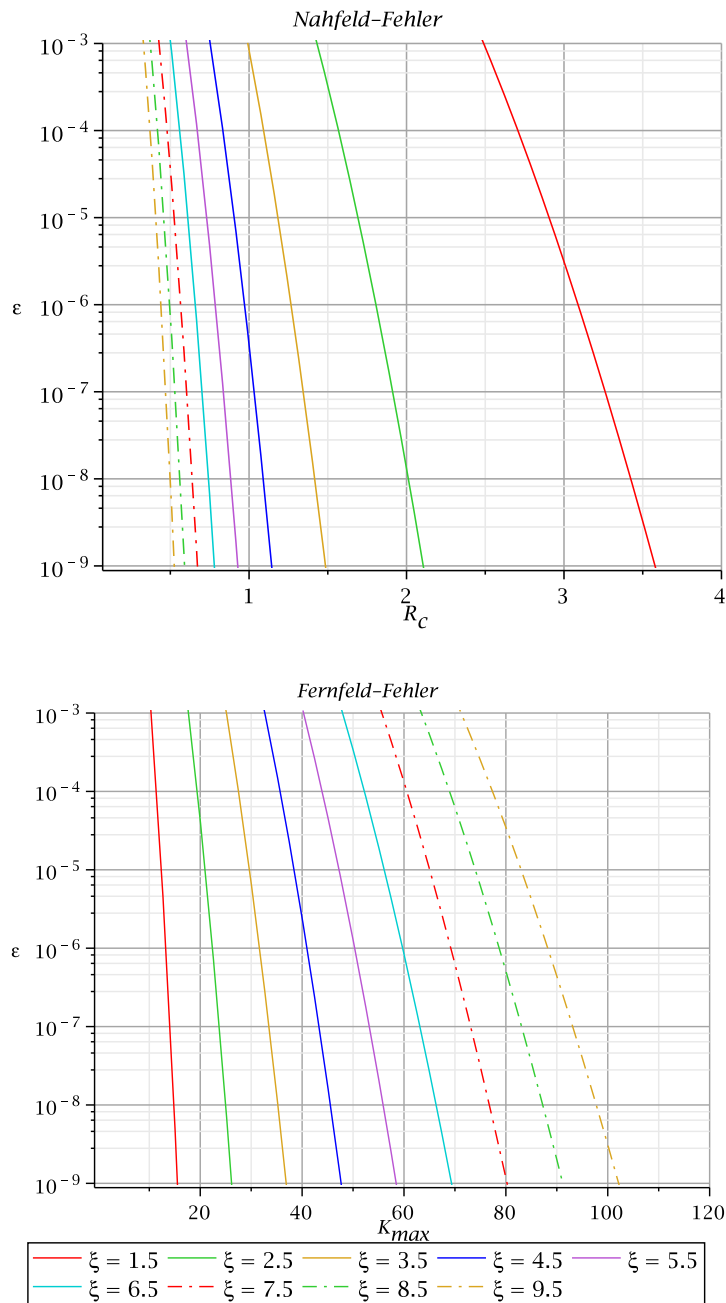
Alle in diesem Kapitel aufgeführten Grafiken wurden für ein Simulationssystem betrachtet, in dem alle Systemgrößen auf die Boxlänge  $L$  normiert sind:

$$\begin{aligned} L_n = 1 & \Rightarrow V_n = 1 \\ a_n &= \frac{1}{2} \cdot \left( \frac{\rho}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \\ \eta_n &= \eta / \left( \frac{\rho}{N} \right)^{\frac{2}{3}} \\ \rho_n &= N \end{aligned} \tag{4.1}$$

Tiefstehendes  $n$  steht für normierte Größe,  $N$  ist die Anzahl der Teilchen im System.

### 4.1 Fehlerverhalten in Abhängigkeit von Parametern

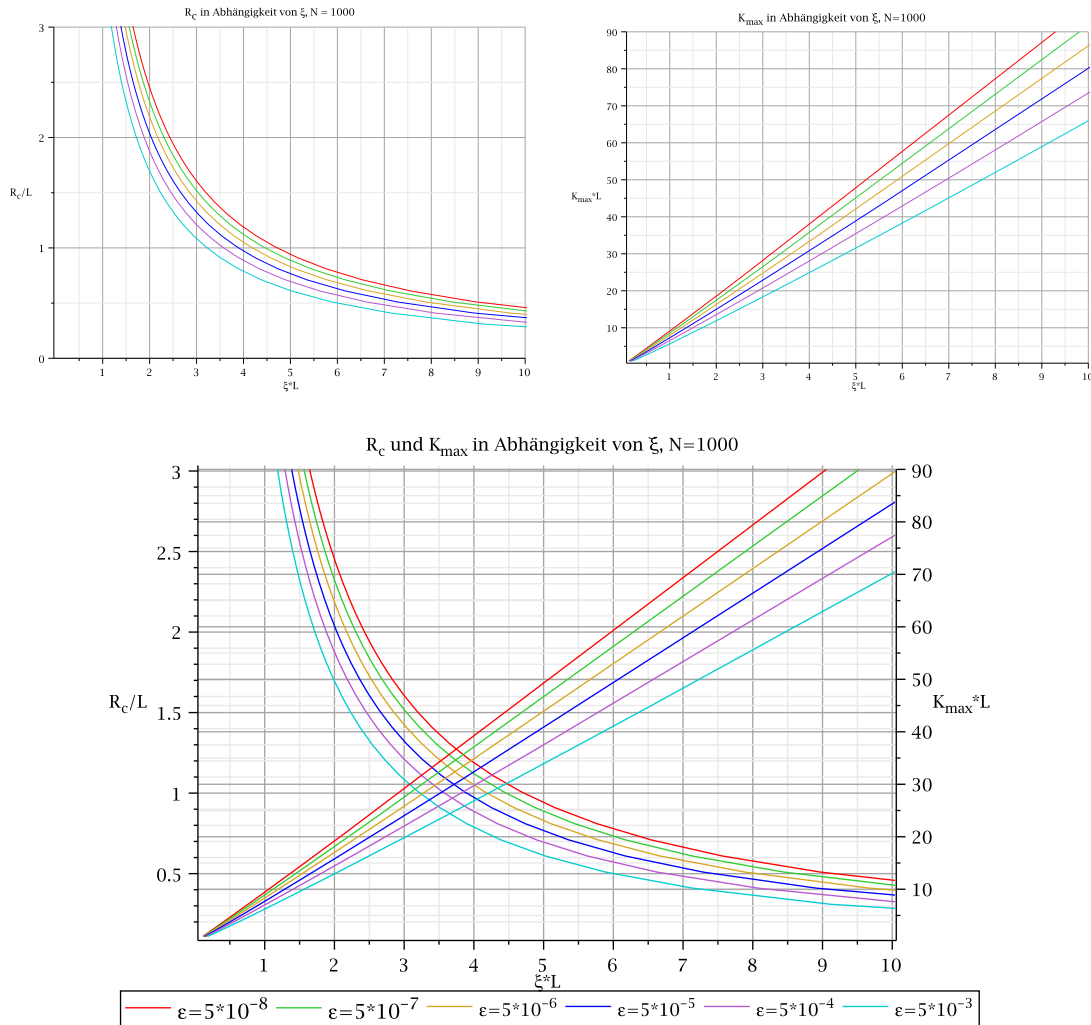
Als erstes werden die Funktionen  $\varepsilon_{nah}(R_c)$  und  $\varepsilon_{fern}(K_{max})$  (vgl. (3.43), (3.68)) in Abhängigkeit von den Abschneideparametern  $R_c$  und  $K_{max}$  betrachtet, um einen generellen Eindruck zu erhalten, für welche Werte die gewünschte Fehlerschranke erreicht werden kann. Abb. 4.1 stellt diese Funktionen für unterschiedliche  $\xi$ -Werte dar. Es ist sehr deutlich zu sehen, dass die Wahl des  $\xi$ -Wertes die Konvergenz der Nah- und Fernfeld-Summe entgegengesetzt beeinflusst und eine wirklich gute Konvergenzgeschwindigkeit erst bei Werten erreicht wird, die für die jeweils andere Summe aufgrund inakzeptabler Kosten auszuschließen sind. Ein auffallendes Ergebnis dieser Abbildung ist, dass die Einhaltung des in der Praxis üblichen Cutoff-Radius  $R_c \leq L/2$  (hier 0.5) bei einer Fehlerschranke



**Abbildung 4.1:** Fehlerfunktionen  $\varepsilon_{nah}(R_c)$  und  $\varepsilon_{fern}(K_{max})$  für unterschiedliche  $\xi$ -Werte für  $N = 1000$

$\varepsilon \leq 5 \times 10^{-3}$  erst für einen Mindestwert  $\zeta \geq 7.5$  möglich ist. Möchte man eine höhere Approximationsgenauigkeit einstellen, ist man gezwungen, entweder den Cutoff-Radius auszudehnen, was zu einer deutlich höheren Laufzeit der Nahfeld-Summe führt, oder den  $\zeta$ -Wert und damit die Anzahl der Fernfeld-Summanden zu erhöhen.

Zum besseren Verständnis des Zusammenhanges zwischen der Wahl des  $\zeta$ -Wertes und



**Abbildung 4.2:** Abhängigkeit der Parameter  $R_c$  und  $K_{\max}$  von den  $\zeta$ -Werten

den daraus resultierenden Einstellungen für die Abschneideparameter  $R_c$  und  $K_{\max}$  wird Abb. 4.2 aufgeführt. Diese Abbildung stellt die Entwicklung der Parameter  $R_c$  und  $K_{\max}$  in Abhängigkeit von  $\zeta$  für unterschiedliche Fehlerschranken dar. Bei wachsenden  $\zeta$ -Werten kann man für die Berechnung der Nahfeld-Summe einen immer kleineren Cutoff-Radius wählen und damit die Anzahl der zu berücksichtigenden Teilchen reduzieren. Allerdings führt das dazu, dass die Anzahl der Summanden für die Fernfeld-Summe vergrößert wird.

Ein wichtiges Kriterium für die Wahl des Parameters  $\zeta$  ist die Laufzeit der einzelnen Summen. Je nach Problemstellung ist es sinnvoll, den Cutoff-Radius klein wählen zu können und dafür mehr Wechselwirkungen über den reziproken Raum zu erfassen, um

die Laufzeit der Nahfeld-Summe nicht überproportional zu vergrößern. Besonders bei großen Systemen ist das der Fall. Im folgenden wird die Laufzeit der einzelnen Summen abgeschätzt und in Abhängigkeit vom Parameter  $\xi$  grafisch dargestellt.

## 4.2 Laufzeitabschätzung

Um insgesamt eine gute Laufzeit für die Ewald-Summation zu erhalten, müssen sowohl die Nah- als auch die Fernfeld-Summe möglichst schnell konvergieren. Nimmt man einen  $\xi$ -Wert, der nur bei einer der beiden Summen zur schnellen Konvergenz führt, wird die gesamte Laufzeit durch die jeweils andere verzögert. Es muss also für eine Simulation derjenige Wert für  $\xi$  gefunden werden, der die Summe der Laufzeiten für die beiden Summen minimiert.

Dieser Wert hängt nicht nur von der Systemgröße, sondern auch von der Implementierung der Simulation, der Rechnerarchitektur, dem verwendeten Compiler und der eingestellten Optimierungsstufe ab. Daher müsste man seine genaue Ermittlung idealerweise mittels Zeitmessungen zur Programmlaufzeit durchführen. Um zuvor einen Anhaltspunkt für eine sinnvolle Parameterwahl zu haben und eine Vorstellung der Größenordnung zu erhalten, werden hier nun zuerst Abschätzungen über die Anzahl der Rechenoperationen angeführt, die für die Berechnung der einzelnen Summanden nötig sind. Darauf aufbauend werden dann Abschätzungen für die jeweiligen Summen vorgenommen.

Um eine realistische Laufzeitabschätzung für die Berechnung der Wechselwirkungen des Nahfeld-Anteils zu erhalten, muss außerdem der Aufwand für die Ermittlung der Teilchen innerhalb des Cutoff-Radius  $R_c$  berücksichtigt werden. Überschreitet  $R_c$  die halbe Boxlänge, steigt die Anzahl der Bildboxen, in denen relevante Nachbarpartikel liegen können, schrittweise kubisch an, d.h. wie  $(2n + 1)^3$ , wenn  $n$  die Anzahl der nächsten Nachbarboxen in eine Richtung bedeutet.

Gesucht sind also die Laufzeit-Funktionen  $\tau(\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}))$  und  $\tau(\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}))$  für den Nah- und Fernfeldbereich (vgl. Gl. (2.20)) und der Aufwand  $\tau_{Vergl}$  für die Ermittlung der nächsten Nachbar-Teilchen. Im folgenden werden zuerst die Rechenoperationen der Nah- und Fernfeld-Summe gezählt. Sowohl in  $\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r})$  aus Gl. (2.21) als auch in  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k})$  aus Gl. (2.22) werden nicht nur einfache arithmetische Operationen durchgeführt, sondern auch Exponentialfunktionen und Projektor-Matrizen bestimmt. Weiterhin müssen im Fernfeld-Anteil in jedem Summationsschritt eine cos-Funktion berechnet werden, sowie im Nahfeld-Anteil eine komplementäre Fehlerfunktion, deren Bestimmungen vergleichsweise kostenintensiv sind.

Sei  $a$  die Laufzeit der Addition und der Multiplikation und  $b$  die Laufzeit der Division. Für die cos- und exp-Funktion (hier bezogen auf die Implementierungen der `double`-Funktionen `exp` bzw. `cos` aus der Cephes Bibliothek [10] (Teil der `netlib`-Bibliothek), die grundsätzliche Vorgehensweise ist in anderen Bibliotheken ähnlich) gilt: Die Funktionen werden jeweils über Polynome unterschiedlichen Grades bzw. deren Verknüpfungen berechnet. Die Auswertung eines Polynoms vom Grad  $n$  erfolgt schleifenbasiert in  $n$  Durchläufen mit jeweils einer Addition und einer Multiplikation, also gilt für die Laufzeit:

$$\tau(pol(n)) = 2na \tag{4.2}$$

Die Untersuchung der  $\text{erfc}$ -Funktion ergibt, dass neben Polynomberechnungen noch ein Aufruf der  $\exp$ -Funktion stattfindet. Zusammenfassend gilt also für die Laufzeiten der Bibliotheksfunktionen:

$$\tau(\exp(x)) \approx \tau(\text{pol}(2)) + \tau(\text{pol}(3)) + 11a + b \approx 21a + b \quad (4.3)$$

$$\tau(\cos(x)) \approx \tau(\text{pol}(5)) + 15a + b \approx \tau(\exp(x)) \quad (4.4)$$

$$\tau(\text{erfc}(x)) \approx 2\tau(\text{pol}(8)) + \tau(\exp(x)) + 2a + b \approx 4\tau(\exp(x)) \quad (4.5)$$

Die Berechnungszeit für die Projektor-Matrizen ist folgende:

$$\tau(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) = \tau(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) = 9a + a + 9b = 10a + 9b.$$

In den folgenden Überlegungen werden die für die Berechnung der einzelnen Summanden benötigten Rechenschritte nur einfach abgezählt, das durch Zusammenfassen von Koeffizienten und Potenzen vorhandene Optimierungspotential wird vernachlässigt. Für die Laufzeit der Berechnungen vom Term  $\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r})$  der Nahfeld-Summe gilt:

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r})) &= 59a + 3b + \tau(\text{erfc}(\xi r)) + \tau(\exp(-\xi^2 r^2)) \\ &\quad + \tau(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{r}}) + 74a + 3b + \tau(\text{erfc}(\xi r)) + \tau(\exp(-\xi^2 r^2)) \\ &= 143a + 15b + 2\tau(\text{erfc}(\xi r)) + 2\tau(\exp(-\xi^2 r^2)) \\ &= 143a + 15b + 168a + 8b + 42a + 2b \\ &= 353a + 25b \end{aligned} \quad (4.6)$$

Die Laufzeit des Hauptterms  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k})$  der Fernfeld-Summe sieht wie folgt aus:

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k})) &= 34a + 4b + \tau(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{k}}) + \tau(\exp(-\frac{1}{4\xi^2}k^2)) \\ &= 44a + 13b + \tau(\exp(-\frac{1}{4\xi^2}k^2)) \\ &= 65a + 14b \end{aligned} \quad (4.7)$$

Sei  $N(R_c)$  die vom Cutoff-Radius abhängende Anzahl der Teilchen, die für die Berechnungen der Nahfeld-Summe berücksichtigt werden. Sei

$$\mathbf{S}_i^N := \sum_{j=1}^{N(R_c)} \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}_{ij})$$

der Wert des Rotne-Prager-Tensors für die kurzreichweitigen Wechselwirkungen unter Berücksichtigung aller Teilchen innerhalb des Cutoff-Radius  $R_c$ . Dann gilt für die Laufzeit der Nahfeld-Summe (ohne die Multiplikation mit der von Teilchen ausgeübten Kraft) folgendes:

$$\tau(\mathbf{S}_i^N) = \sum_{j=1}^{N(R_c)} \tau(\mathbf{M}^{(1)}(r)) = N(R_c) \cdot (353a + 25b) \quad (4.8)$$

Die durchschnittliche Teilchenanzahl innerhalb des Cutoff-Radius bei angenommener Gleichverteilung von insgesamt  $N$  Teilchen in einer Simulationsbox kann mit

$$N(R_c) \approx \frac{4\pi R_c^3}{3L^3} \cdot N \quad (4.9)$$

angenommen werden, wobei  $L$  die Boxlänge ist. Damit ist die Laufzeit der Nahfeld-Summe ungefähr folgende:

$$\tau(\mathbf{S}_i^N) = \frac{4\pi R_c^3}{3L^3} \cdot N(353a + 25b) \quad (4.10)$$

Für die Prüfung, welche Teilchen überhaupt innerhalb des Cutoff-Radius liegen, müssen paarweise die Abstände zwischen ihnen betrachtet werden. Für  $R_c \leq L/2$  ist es möglich, dies mittels Transposition bestimmter Teilchen nur über die Betrachtung der Zentralbox zu erreichen. Für  $R_c > L/2$  müssen mit steigendem  $R_c$  immer mehr benachbarte Bildboxen berücksichtigt werden, nämlich  $\lceil R_c \rceil$  in jede Richtung.

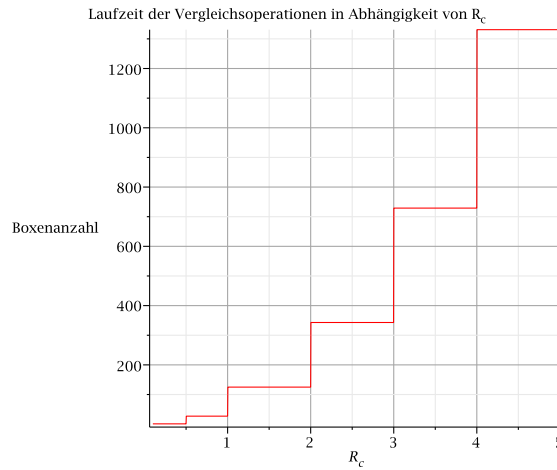
Sei

$$G_{Box} := \begin{cases} 1, & R_c \leq \frac{L}{2} \\ (2\lceil R_c \rceil + 1)^3, & R_c > \frac{L}{2} \end{cases} \quad (4.11)$$

die Gesamtanzahl der zu betrachtenden Boxen. Insgesamt werden also

$$N \cdot G_{Box} - 1$$

Vergleiche benötigt. Für jeden dieser Vergleiche muss der quadratische Abstand zwi-



**Abbildung 4.3:** Anzahl der zu berücksichtigenden Boxen in Abhängigkeit vom Cutoff-Radius

schen zwei Teilchen über ein Skalarprodukt der Teilchenpositionen und der Box-Offsets berechnet werden:

$$r_{ij}^2 = (r_{ix} - r_{jx} + g_x)^2 + (r_{iy} - r_{jy} + g_y)^2 + (r_{iz} - r_{jz} + g_z)^2 \quad (4.12)$$

wobei  $\mathbf{g}_i = L \cdot \mathbf{n}$  ein Gittervektor ist (vgl. Kap. 2.2). Dieses Skalarprodukt benötigt  $14a$  Operationen. Der Gesamtaufwand für Ermittlung der Teilchen innerhalb von  $R_c$  ist also

$$\tau_{Vergl} = (N \cdot G_{Box} - 1) \cdot 14a \approx N \cdot G_{Box} \cdot 14a \quad (4.13)$$

Die Überlegungen zur Laufzeit der Fernfeld-Summe sind analog zu denen der Nahfeld-Summe, allerdings müssen dabei immer nur die Teilchen der Zentralbox berücksichtigt werden. Sei

$$\mathbf{S}_i^F := \sum_{\lambda}^{\Lambda(K_{max})} \sum_{j=1}^N \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_{\lambda}) \cdot \cos\{\mathbf{k}_{\lambda} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)\}$$

der Wert des Rotne-Prager-Tensors für die langreichweitigen Wechselwirkungen unter Berücksichtigung aller reziproken Vektoren, deren Länge unterhalb des Wertes  $K_{max}$  liegt. Für die Laufzeit der Fernfeld-Summe (wiederum ohne Berücksichtigung der Kraft) gilt dann:

$$\begin{aligned} \tau(\mathbf{S}_i^F) &= \sum_{\lambda}^{\Lambda(K_{max})} \sum_{j=1}^N \tau\left(\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_{\lambda}) \cdot \cos\{\mathbf{k}_{\lambda} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)\}\right) \\ &= \Lambda(K_{max}) \cdot N \cdot (65a + 14b + 9a + 8a + \tau(\cos)) \\ &= \Lambda(K_{max}) \cdot N \cdot (103a + 15b) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Die Anzahl der reziproken Vektoren, über die bei gegebenem Wert  $K_{max}$  aufsummiert wird, entspricht ungefähr der Anzahl der Inkremente  $2\pi/L$  eines  $\mathbf{k}_{\lambda}$  innerhalb der Kugel mit dem Radius  $K_{max}$ .

$$\Lambda(K_{max}) \approx \frac{4\pi K_{max}^3}{3} \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} = \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} \quad (4.15)$$

Damit gilt für die Laufzeit der Fernfeld-Summe folgendes:

$$\tau(\mathbf{S}_i^F) \approx \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} \cdot N (103a + 15b) \quad (4.16)$$

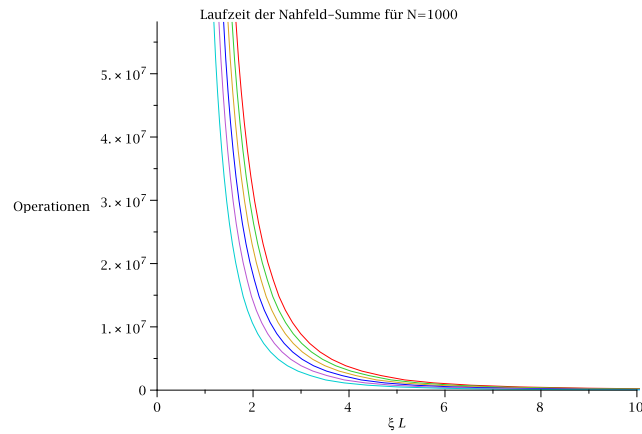
Nach [15] wird die Dauer der Division ungefähr sechs mal so lange wie die der Multiplikation angenommen. Damit kann man die zu minimierende Summe der Laufzeiten von Nah- und Fernfeld-Anteil in Abhängigkeit von Multiplikationsdauer und Abschneideparameter wie folgt ausdrücken:

$$\begin{aligned} \tau_{ges} &:= \tau(\mathbf{S}_i^N) + \tau(\mathbf{S}_i^F) + \tau_{Vergl} \\ &= \frac{4\pi R_c^3}{3L^3} \cdot N (353a + 25b) + \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} \cdot N (103a + 15b) + N \cdot G_{Box} \cdot 14a \\ &= \frac{4\pi R_c^3}{3L^3} \cdot N \cdot 503a + \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} \cdot N \cdot 193a + N \cdot G_{Box} \cdot 14a \\ &= N \cdot a \left( 503 \cdot \frac{4\pi R_c^3}{3L^3} + 193 \cdot \frac{L^3 K_{max}^3}{6\pi^2} + 14 \cdot G_{Box} \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

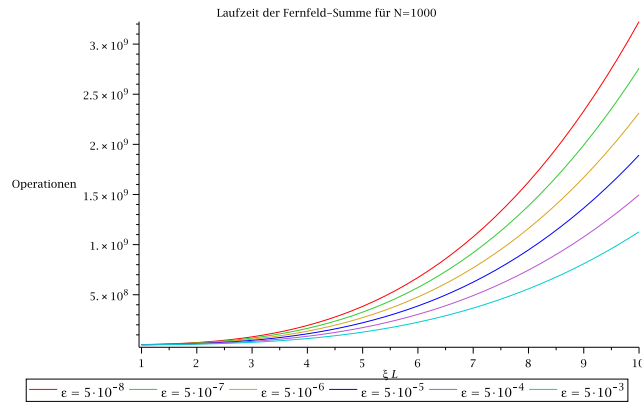
Abb. 4.4 zeigt, dass die Laufzeit-Kurven für den Nah- und Fernfeld-Anteil grundsätzlich das gleiche Verhalten in Abhängigkeit vom Parameter  $\xi$  aufweisen wie die Abschneideparameter selbst (vgl. Abb. 4.2): mit wachsendem  $\xi$  fällt die Nahfeld-Laufzeit, dafür steigt aber die Fernfeld-Laufzeit. Der zusätzliche Rechenaufwand, der durch die Ermittlung der Teilchen innerhalb des Cutoff-Radius entsteht, ist im Vergleich zum Gesamtaufwand vernachlässigbar.

In der Abb. 4.5 sind die Laufzeit-Kurven für jeweils unterschiedliche Fehlerschranken und Systemgrößen dargestellt. Es ist deutlich zu sehen, dass der optimale  $\xi$ -Wert kaum





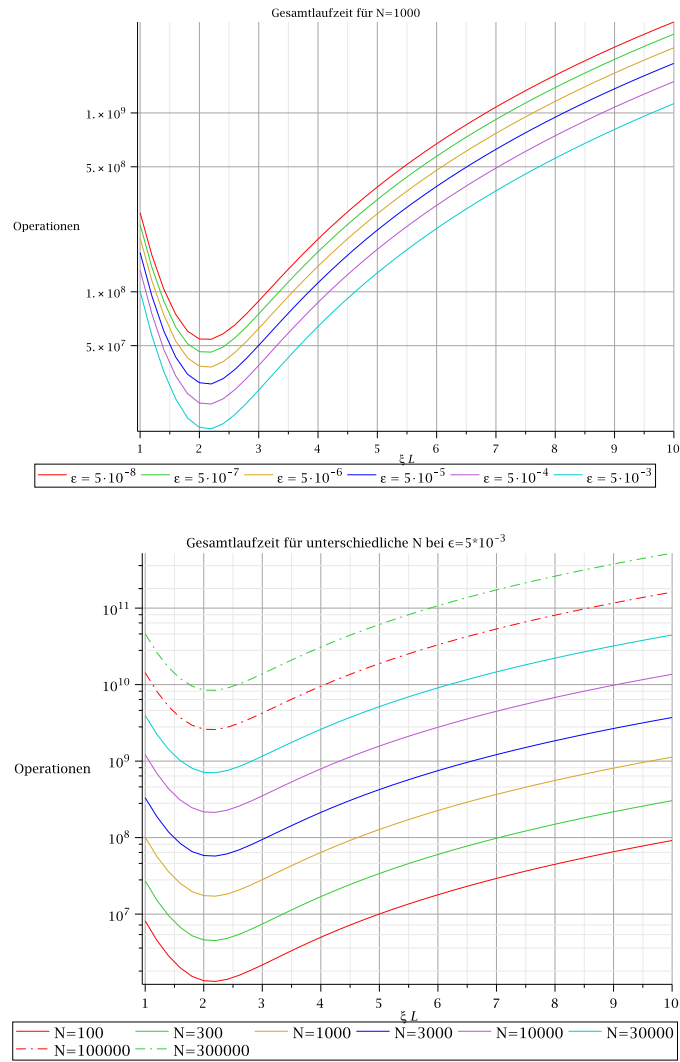
(a) Nahfeld-Laufzeit incl. Vergleichsaufwand für 1000 Teilchen



(b) Fernfeld-Laufzeit

**Abbildung 4.4:** Laufzeitschätzung in Abhängigkeit von  $\xi$

von diesen Größen abhängig ist. Der hier untersuchte Berechnungsaufwand für die Wechselwirkungen steigt für ein einzelnes Teilchen linear mit der Teilchenanzahl an, also verhält sich der Aufwand für das Gesamtsystem quadratisch zur Teilchenanzahl.



**Abbildung 4.5:** Abschätzung für die gesamte Laufzeit in Abhängigkeit von  $\xi$  für unterschiedliche Fehlerschranken und Teilchenanzahlen



## 5 Simulation

Nachdem die Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors im Hinblick auf den Approximationsfehler und die damit zusammenhängende Wahl der Abschneide- und Konvergenzparameter analytisch und grafisch untersucht wurde, war es naheliegend, die gewonnenen Ergebnisse in einer Simulation zu überprüfen. Als Simulationstechnik wurde Brownian-Dynamics-Methode gewählt, bei der hydrodynamischen Wechselwirkungen zwischen den Teilchen berücksichtigt werden können. In dieser Methode werden die hydrodynamischen Wechselwirkungen je nach Problemstellung bzw. Approximation über den Rotne-Prager-Tensor oder Oseen-Tensor ermittelt. In der vorliegenden Arbeit wurde der Rotne-Prager-Tensor verwendet und über die Ewald-Summation berechnet. Dabei wurde das in vorigen Kapiteln hergeleitete Fehlerverhalten berücksichtigt und weiter untersucht.

### 5.1 Brownian-Dynamics-Methode

Die Brownian-Dynamics-Methode beschreibt die Bewegung von Teilchen, deren Masse und Größe die der Teilchen des Umgebungsmediums (hier der Flüssigkeit) deutlich übersteigt [4, 9]. Die Teilchenbewegungen werden durch häufige Kollisionen mit den Flüssigkeits-Molekülen ausgelöst und durch die Kräfte der anderen Teilchen im System sowohl nach den Gesetzen der klassischen Mechanik als auch der Hydrodynamik beeinflusst.

Bei einer Computersimulation wird ausgehend von einer Startkonfiguration ein System mit  $N$  Teilchen über eine vorgegebene Anzahl von Zeitschritten betrachtet. In jedem Zeitschritt wird jedes Teilchen in Abhängigkeit der auf es wirkenden Kräfte propagiert. Um diese Teilchenbewegung beschreiben zu können, verwendet man die Langevin-Gleichung als stochastische Bewegungsgleichung, die integriert werden kann [4]. Außerdem werden in jedem Simulationsschritt Teilcheneigenschaften wie die potentielle Energie und quadratische Bewegungsabstände ermittelt und statistisch ausgewertet. Die Simulationsergebnisse werden umso besser approximiert, je länger die Simulation durchgeführt wird.

Die Teilchentrajektorien werden numerisch nach folgendem Algorithmus berechnet [4]:

$$r_i^{(n+1)} = r_i^n + \sum_j \frac{\partial D_{ij}^n}{\partial r_j} \Delta t + \sum_j \frac{D_{ij}^n F_j^n}{kT} \Delta t + R_i(\Delta t) \quad (5.1)$$

Die Indizes  $i$  und  $j$  laufen über die kartesischen Teilchenkoordinaten ( $1 \leq i, j \leq 3N$ ), die Hochstellung  $n$  markiert die Größen aus dem vorherigen Iterationsschritt.  $k$  ist die Boltzmann-Konstante,  $T$  ist die absolute Temperatur,  $F$  ist die Kraft und  $D_{ij}$  sind die Elemente der Rotne-Prager-Tensoren (vgl. Gl. (2.9) Kap. 2.2.2) für alle  $N$  Teilchen des

Systems.  $R_i(\Delta t)$  ist eine Zufallszahl, die den stochastischen Charakter der Brownschen Bewegung zum Ausdruck bringt. Sie ist Gauß-verteilt mit dem Erwartungswert 0 und der folgenden Kovarianzmatrix:

$$\langle R_i(\Delta t) R_j(\Delta t) \rangle = 2D_{ij}^n \Delta t \quad (5.2)$$

Dabei erfolgt die Bestimmung von korrelierten Zufallszahlen mit Hilfe des Cholesky-Verfahrens.

Wie man sieht, tauchen die Positionen und Momente der Flüssigkeits-Moleküle bei der Berechnung der Teilchenbewegungen gar nicht auf, und nur die zu untersuchenden Teilchen sind relevant.

Sowohl der Oseen-Tensor als auch der Rotne-Prager-Tensor haben die Eigenschaft, dass ihre Ableitungen nach  $\mathbf{r}_j$  gleich 0 sind. Es gilt also:

$$\sum_j^{3N} \frac{\partial D_{ij}^n}{\partial r_j} = 0 \quad (5.3)$$

Das hat den großen den Vorteil, dass der Gradient des Rotne-Prager-Tensors in der Simulation nicht ausgerechnet werden muss. Möchte man allerdings den Rotne-Prager-Tensor über die Ewald-Summation berechnen, muss überprüft werden, ob diese Eigenschaft immer noch erfüllt ist.

### 5.1.1 Gradient des Rotne-Prager-Tensors in der Ewald-Summation

Sei  $\mathbf{r}_{ij} := \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$  der Abstandsvektor zwischen dem Teilchen  $i$  und dem Teilchen  $j$ . Betrachtet man die Gleichung 2.18, erhält man für den Rotne-Prager-Tensor in der Ewald-Summation

$$6\pi\eta a \mathbf{M}(\mathbf{r}_{ij}) = \mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) \quad (5.4)$$

$$(5.5)$$

mit  $\mathbf{M}^{(1)}(\mathbf{r}_{ij})$  definiert wie in Gl. (2.21). Für  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij})$  gilt:

$$\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) = \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \cos(\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}_{ij}) \quad (5.6)$$

wobei  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda)$  in Gl. (2.22) definiert ist.

Zuerst wird der Fernfeld-Anteil betrachtet. Leitet man  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij})$  nach  $r_j$  ab, erhält man folgendes Ergebnis:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r_j} \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) &= \frac{\partial}{\partial r_j} \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \cos(\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}_{ij}) \\ &= \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) \frac{\partial}{\partial r_j} \cos(\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}_{ij}) \\ &= \sum_{\substack{\lambda \\ k_\lambda \neq 0}} \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda) (-\sin(\mathbf{k}_\lambda \cdot \mathbf{r}_{ij})) \cdot \mathbf{k}_\lambda \cdot (-3) \end{aligned} \quad (5.7)$$

Multipliziert man  $\mathbf{k}_\lambda$  mit dem Vorfaktor  $(\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}_\lambda \hat{\mathbf{k}}_\lambda)$  aus  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{k}_\lambda)$ , erhält man für jedes  $\lambda$  folgendes:

$$\begin{aligned} (\mathbf{1} - \hat{\mathbf{k}}_\lambda \hat{\mathbf{k}}_\lambda) \mathbf{k}_\lambda &= \mathbf{k}_\lambda - \mathbf{k}_\lambda \frac{\mathbf{k}_\lambda \mathbf{k}_\lambda}{k_\lambda^2} \\ &= \mathbf{k}_\lambda - \mathbf{k}_\lambda \\ &= 0 \end{aligned} \tag{5.8}$$

Damit verschwindet die Ableitung des Fernfeld-Anteils des Rotne-Prager-Tensors im Fourier-Raum identisch für jeden  $\mathbf{k}$ -Vektor.

Der Nahfeld-Anteil  $\mathbf{M}^{(1)}(r_{ij})$ , aufgeführt in Gl. (2.21), ist nach [3] durch das direkte Ausrechnen der Gleichung

$$\mathbf{M}^{(1)}(r) = \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) \{r \operatorname{erfc}(\xi r)\} \tag{5.9}$$

hergeleitet. Das bedeutet, dass für  $\mathbf{M}^{(1)}(r_{ij})$  aus (2.21) gilt:

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{(1)}(r_{ij}) &= \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) r_{ij} \cdot (1 - \operatorname{erf}(\xi r_{ij})) \\ &= \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) \cdot r_{ij} - \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) r_{ij} \cdot \operatorname{erf}(\xi r_{ij}) \\ &= \left( \frac{3}{4}a + \frac{1}{4}a^3 \nabla^2 \right) (\nabla^2 \mathbf{1} - \nabla \nabla) \cdot r_{ij} - \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) \\ &= \mathbf{M}^*(r_{ij}) - \mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij}) \end{aligned} \tag{5.10}$$

Nach [3] ist aber  $\mathbf{M}^*(r_{ij})$  eine Alternativdarstellung für den Rotne-Prager-Tensor aus Gl. (2.9), dessen Gradient 0 ergibt.  $\mathbf{M}^{(2)}(\mathbf{r}_{ij})$  ist nach (5.8) gleich 0. Weil die Ableitungen der einzelnen Summanden verschwinden, ist die gesamte Ableitung des Rotne-Prager-Tensors in der Ewald-Sumimation und seiner Approximation, die durch Abschneiden der Summen entsteht, auch 0, und man kann auf die Berechnung seines Gradienten in der Simulation verzichten.

## 5.2 Verifizierung der Fehlerabschätzung

Um die Fehlerabschätzung zu überprüfen, wurde die Ewald-Sumimation des Rotne-Prager-Tensors (vgl. (2.20)) in der Programmiersprache C implementiert und in eine bestehende, vom Fortran77 in C umgeschriebene Brownian-Dynamics-Simulation eingebunden. Die Abschneideparameter  $R_c$  für die Nahfeld- und  $K_{max}$  für die Fernfeld-Summe werden im Programm über die hergeleiteten Fehlerschranken (3.43) und (3.68) ermittelt. Bei der Verifizierung der Fehlerabschätzung ging es darum, die einzelnen Tensor-Elemente auf Konvergenz im vorgegebenen Fehlerbereich zu untersuchen. Dafür wurde zuerst der Wert  $\varepsilon = 5 \times 10^{-12}$  (vgl. (3.1)) als Fehlerschranke gewählt und der damit für  $N$ -Teilchen berechnete Rotne-Prager-Tensor als Referenzwert genommen. Danach wurde die Fehlerschranke von  $10^{-5}$  bis  $10^{-2}$  schrittweise vergrößert und der dazugehörige

Näherungstensor mit dem Referenztensor verglichen. Der Vergleich erfolgte sowohl elementweise, in dem die Differenz zwischen den einzelnen Tensorelementen und den Referenzelementen auf das Einhalten der vorgegebenen Fehlerschranke überprüft wurde, als auch spaltenweise über die Betragsummennorm und die Länge des Differenzvektors zum Referenzwert.

Sei

$$\mathbf{D}^{Diff} := \mathbf{D} - \tilde{\mathbf{D}},$$

wobei  $\mathbf{D}$  der Referenztensor und  $\tilde{\mathbf{D}}$  der Näherungstensor sind. Für unterschiedliche Teilchenradien  $a$ , Parameter  $\xi$  und Fehlerschranken  $\varepsilon$  wurden folgende drei Fragestellungen untersucht:

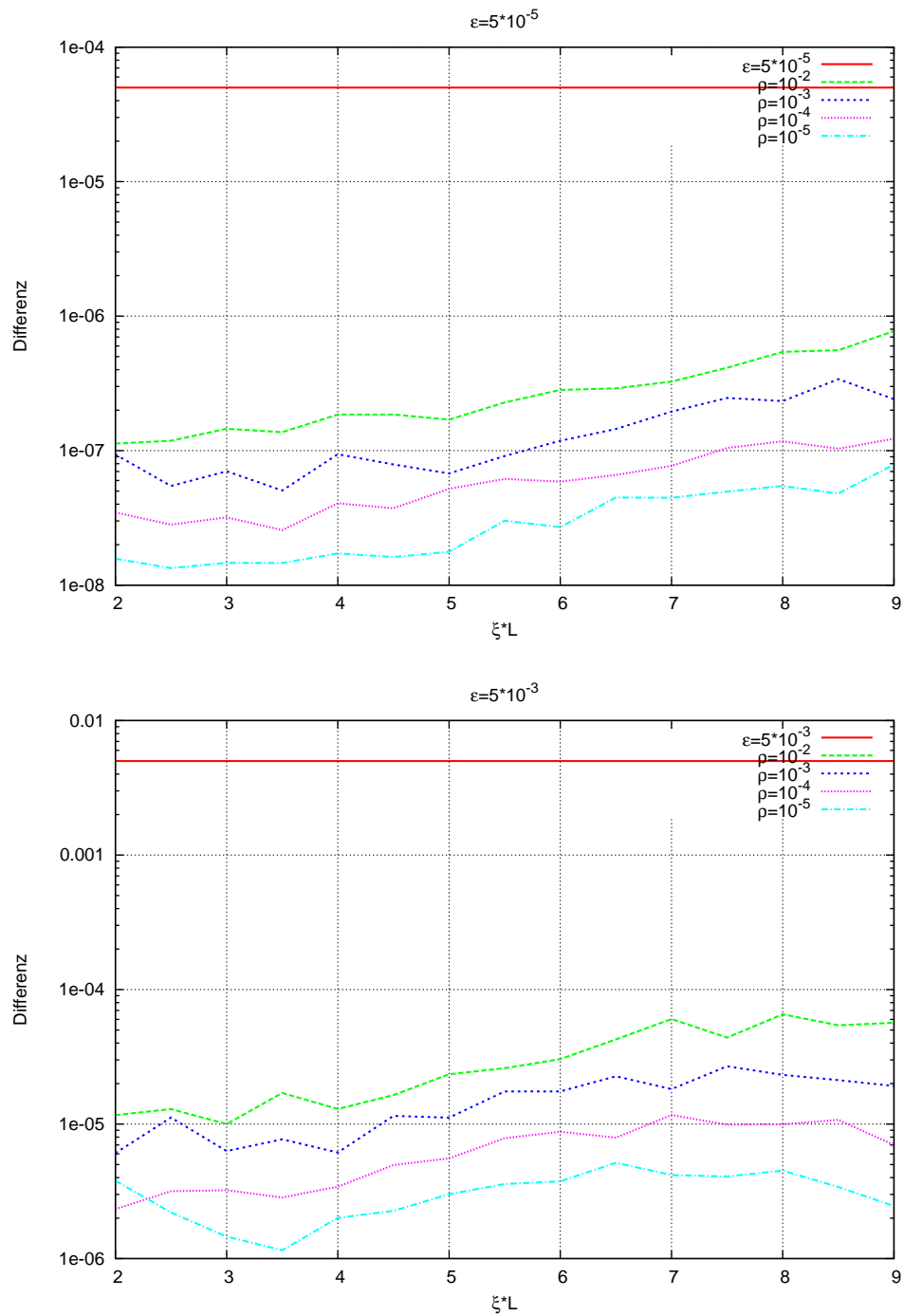
1. Ist  $|D_{ij}^{Diff}| \leq \varepsilon$  für alle  $1 \leq i, j \leq 3N$ ?
2. Gilt  $\|\mathbf{D}^{Diff}\|_1 < \varepsilon$ ?
3. Seien  $\mathbf{d} := (d_i)$ ,  $d_i := \|\mathbf{D}_i\|_1 - \|\tilde{\mathbf{D}}_i\|_1$ ,  $1 \leq i, j \leq 3N$ .  
Gilt  $\|\mathbf{d}\|_2 < \varepsilon$  für alle  $1 \leq i \leq 3N$ ?

Die Untersuchung der ersten Frage hat ergeben, dass bei keiner der Einstellungen die Elemente des Näherungstensors größere Differenzen zum entsprechenden Referenzwert aufgewiesen haben als die eingestellte Fehlerschranke.

Die Ergebnisse der zweiten Frage werden exemplarisch für  $\varepsilon = 10^{-5}$  und  $\varepsilon = 10^{-3}$  in der Abb. 5.1 gezeigt. Auf der Abszisse sind  $\xi$ -Werte aufgetragen, die Ordinate stellt die Spaltensummennorm der Matrix  $\mathbf{D}^{Diff}$  dar, in der elementweise die Abweichungen des Näherungs- zum Referenztensor gespeichert sind. Man sieht, dass bei allen Parametervariationen die vorgegebene Fehlerschranke erfüllt ist und die tatsächliche Differenz zur gewünschten Fehlerschranke für die größte Dichte  $\rho = 10^{-2}$  für alle untersuchten  $\varepsilon$ -Werte in der Größenordnung  $10^{-2}$  liegt. Je kleiner die Dichte wird, desto besser wird die Approximation und desto größer wird der Abstand zur vorgegebenen Fehlerschranke. Das liegt daran, dass für deutlich kleinere Dichten und damit größere Teilchenabstände einfach weniger Summanden, die für das zu betrachtende Teilchen einen nennenswerten Beitrag darstellen, außerhalb des Cutoff-Radius liegen. Damit konvergiert der Rotne-Prager-Tensor innerhalb des fast gleichbleibenden, eingestellten Cutoff-Radius schneller gegen seinen exakten Wert als bei größeren Dichten.

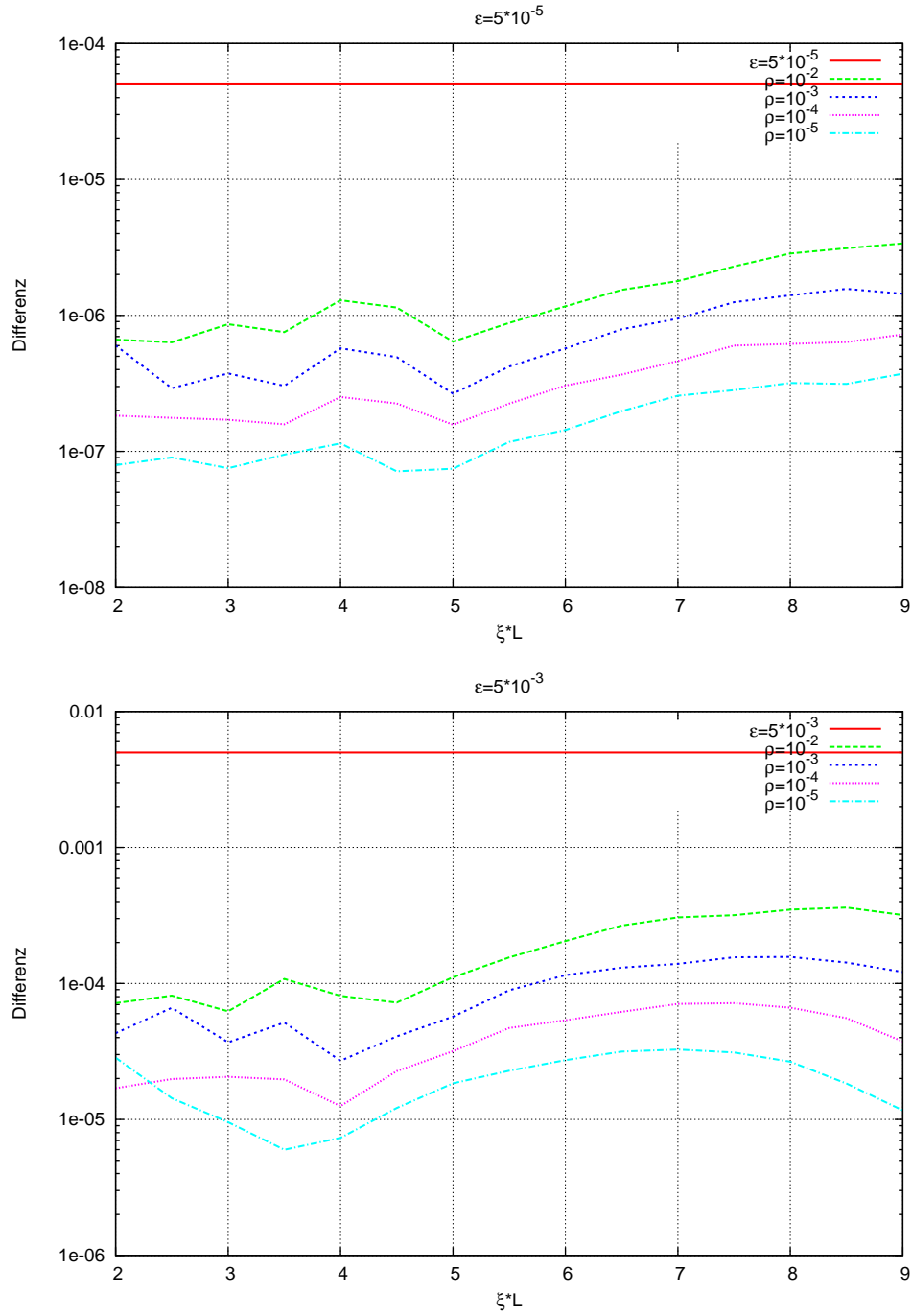
Weiterhin hat diese Untersuchung ergeben, dass sich die Approximation mit steigendem  $\xi$  verschlechtert, sodass die tatsächliche Abweichung vom Referenztensor näher an die gewünschte Fehlerschranke kommt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass mit größerem  $\xi$  der Cutoff-Radius immer kleiner wird und immer weniger Teilchen explizit in die Berechnung eingehen.

Die Antwort auf die Frage 3, in der die Betragsummennormen von allen Zeilenvektoren des Näherungstensors betrachtet und auf den Abstand zum Referenztensor untersucht werden, wird in der Abb. 5.2 dargestellt. Auch hier werden die vorgegebenen Fehlerschranken eingehalten und die Approximationsgüte der Lösung weist das gleiche Verhalten auf, wie in Abb. 5.1.



**Abbildung 5.1:** Differenz zwischen der Spaltensummennorm des Näherungs- und des Referenzensors in Abhängigkeit vom  $\xi$ -Wert für unterschiedliche Teilchendichten





**Abbildung 5.2:** Abstand der Normvektoren des Näherungs- und des Referenzensors in Abhängigkeit vom  $\xi$ -Wert für unterschiedliche Teilchendichten

### 5.2.1 Fehlerstabilität

Als nächstes war zu überprüfen, ob die Fehlerschranke auch in einer über mehrere Tausend Zeitschritte laufenden Simulation eingehalten wird. Da sich in jedem Zeitschritt die Teilchenpositionen verändern, wurde auch der Referenztensor jedes mal neu berechnet und der Näherungstensor nach Kriterien aus dem vorigen Kapitel untersucht. Diese Untersuchung fand am Beispiel der Teilchendichte  $\rho = 10^{-4}$  für  $\varepsilon = 5 \times 10^{-4}$  statt. Die Simulation wurde über 80.000 Schritte betrachtet. Nach jedem hundertsten Schritt wurde der entstandene Fehler untersucht. Die Ergebnisse sind in der Abb. 5.3 dargestellt. Die Änderungen des Fehlers verbleiben innerhalb eines Bruchteils der vorgegebenen Fehlerschranke, was auf eine robuste Fehlerstabilität des Algorithmus und eine zuverlässige Fehlerabschätzung schließen lässt.

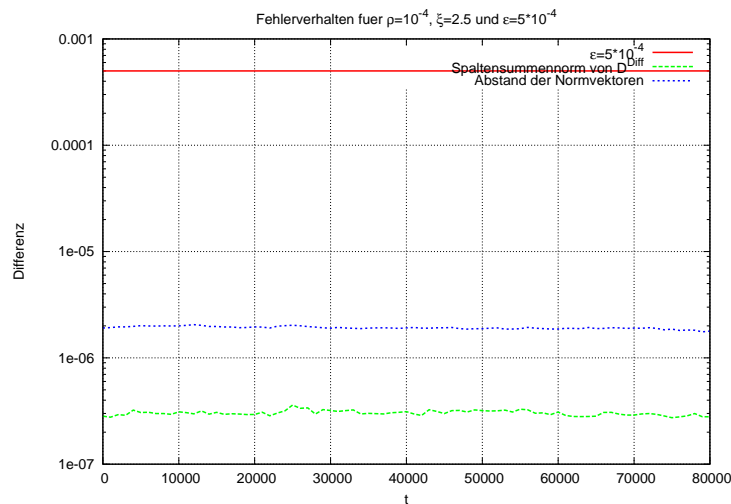
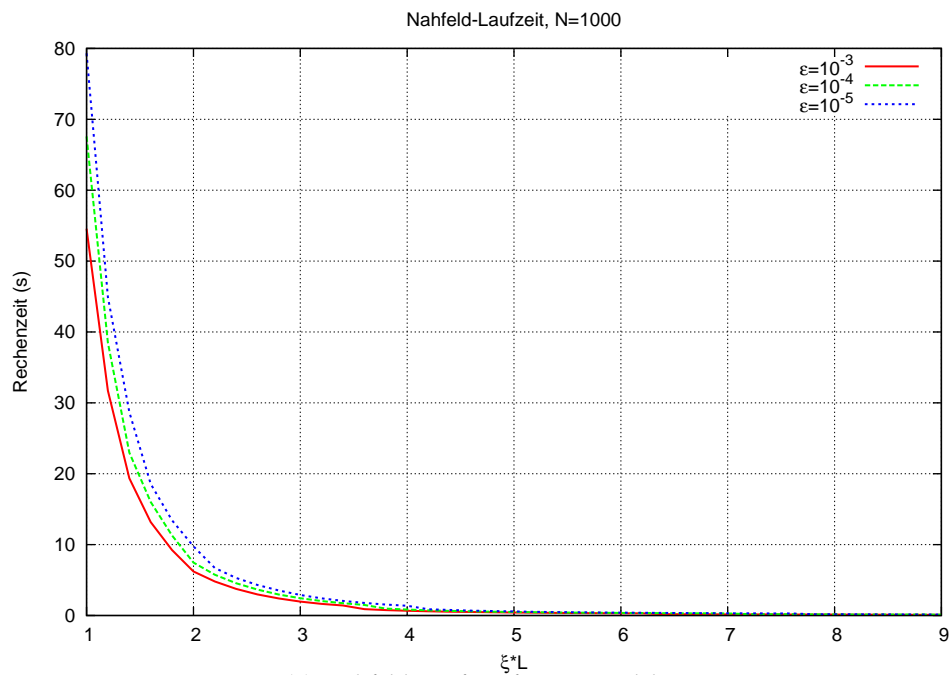


Abbildung 5.3: Fehlerverhalten in einer Simulation

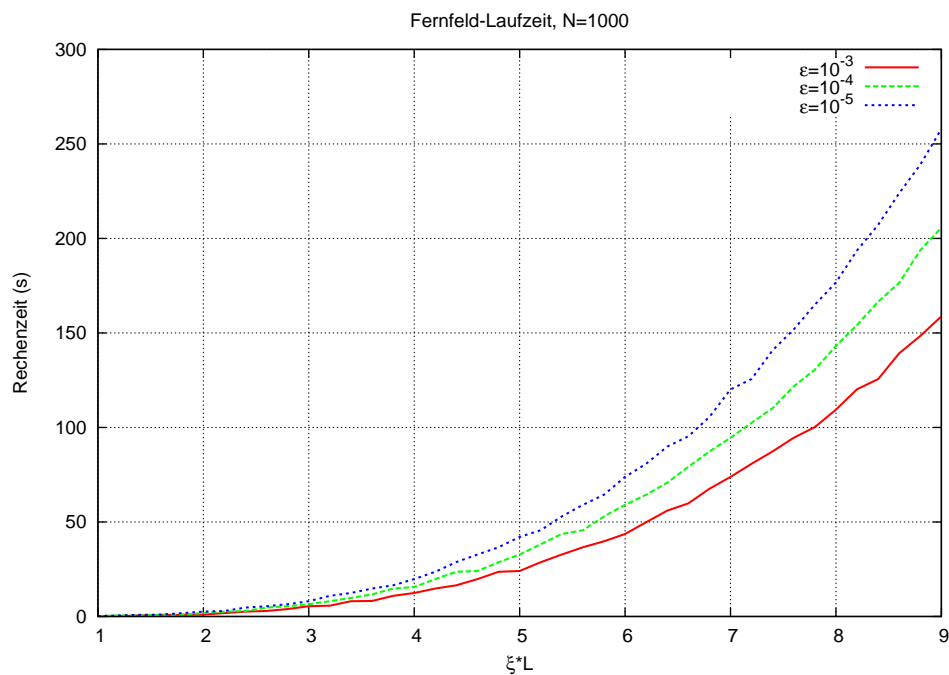
## 5.3 Verifizierung der Laufzeitabschätzung

Ähnlich wie bei der Fehlerverifizierung war es sinnvoll, die theoretischen Überlegungen zur Laufzeit, die im Kap. 4.2 gemacht wurden, zu überprüfen. Exemplarisch wurden Zeitmessungen der Nah- und Fernfeld-Summen auf einem 64 Bit Intel Xeon System mit 3 GHz Taktfrequenz unter dem Betriebssystem Linux und mit dem Compiler Intel ICCE Version 10.1 durchgeführt. Diese Zeitmessungen bezogen sich auf die Berechnung der Matrix  $\mathbf{D}$  (vgl. Gl. (5.1)), die die Rotne-Prager-Tensoren für alle Teilchen im System beinhaltet. Weil die Laufzeitmessungen über die Berechnung kompletter Systeme ermittelt wurden, müssen die Ergebnisse aus dem Kap. 4.2 noch mit dem Faktor  $N$  multipliziert werden. Auf die Lage des Minimums hat dies jedoch keine Auswirkung.

Die Messungen wurden jeweils für ein System mit 125 Teilchen und ein System mit 1000 Teilchen vorgenommen. Abb. 5.4 zeigt die Laufzeitkurven für Nahfeld- und Fernfeld-Berechnungen bei 1000 Teilchen. Weil sich die entsprechenden Kurven für 125 Teilchen gleich verhalten und nur die Ordinatenwerte unterschiedlich sind, werden sie hier nicht



(a) Nahfeld-Laufzeit für 1000 Teilchen



(b) Fernfeld-Laufzeit für 1000 Teilchen

**Abbildung 5.4:** Messergebnis für die Nahfeld- und Fernfeld-Laufzeit bei  $N = 1000$  für unterschiedliche Fehlerschranken

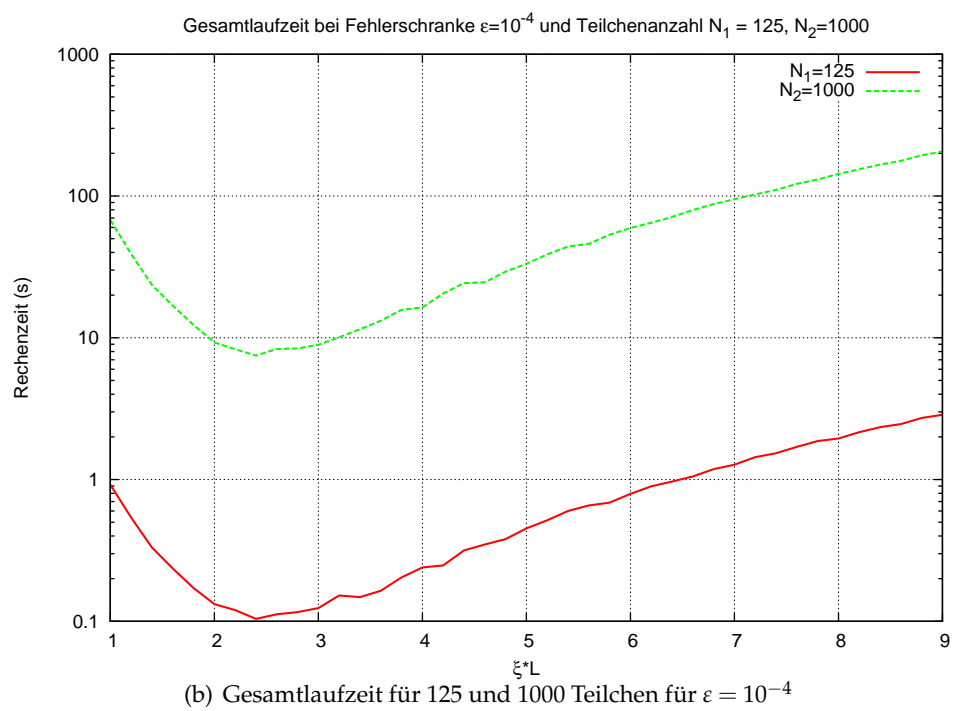
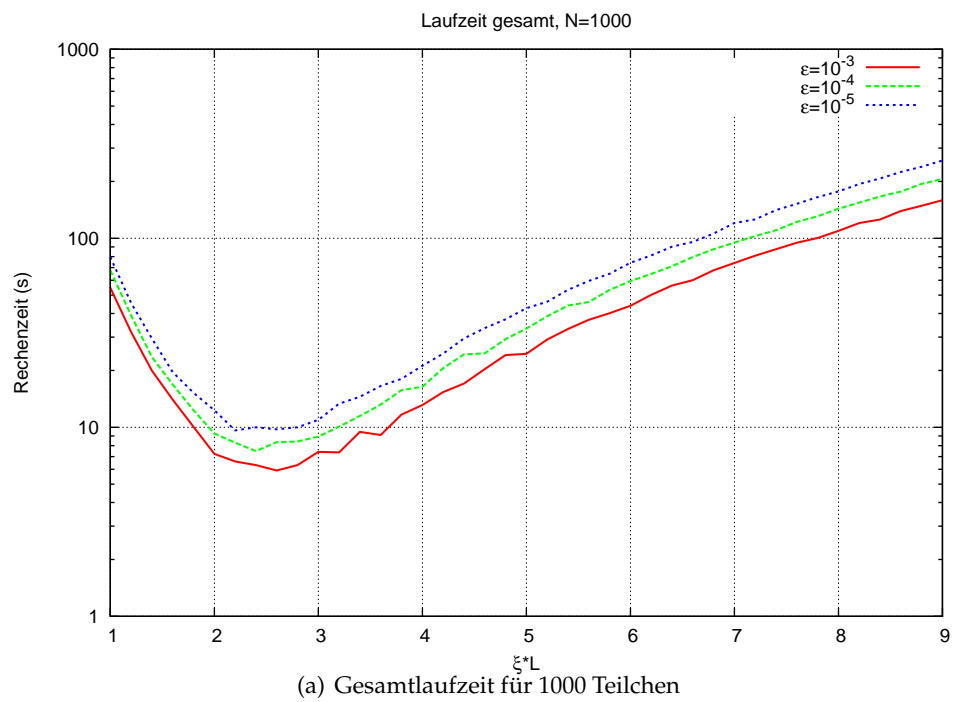


Abbildung 5.5: Messergebnisse für die Gesamtlaufzeit für 125 und 1000 Teilchen

aufgeführt. Das Ergebnis stimmt sehr gut mit der Vorhersage (vgl. Abb. 4.4) überein. Abb. 5.5 (a) stellt die Gesamtlaufzeit bei 1000 Teilchen dar. Für alle untersuchten Fehlerschranken befindet sich das Minimum im gleichen Bereich, den die theoretischen Überlegungen ergeben haben. Anhand der Abb. 5.5 (b), in der die Gesamtlaufzeit für 125 und 1000 Teilchen verglichen wird, ist zu sehen, dass die Anzahl der Teilchen im System keinen Einfluss auf die Lage des Minimums hat. Auch die Laufzeitunterschiede zwischen den Berechnungen für die unterschiedlichen Fehlerschranken liegen im erwarteten Bereich. Das Ergebnis entspricht also vollständig den theoretischen Erwartungen (vgl. Abb. 4.5). Außerdem kann man sehr deutlich erkennen, dass sich die Laufzeit für die Berechnung der Rotne-Prager-Tensoren für alle Teilchen quadratisch mit der Teilchenanzahl verhält.

---

## 6 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde zum ersten Mal eine konsistente Fehleranalyse der Ewald-Summation für hydrodynamische Wechselwirkungen auf dem Rotne-Prager-Level durchgeführt. Desweiteren wurden Optimierungen der Parameterkombinationen analysiert, die die Ewald-Summation charakterisieren. Dabei wurde für eine gegebene Fehlerschranke die Laufzeit minimiert, indem zwischen der realen und reziproken Summe der Ewald-Summation der günstigste Kompromiss gefunden wurde.

Die Ewald-Summation stellt ein klassisches Verfahren dar, eine bedingt konvergente Summe, wie sie bei Gittersummationen in periodischen Systemen auftritt, in einen absolut konvergenten Ausdruck zu überführen. Im Bereich von molekulardynamischen Simulationen hat die Ewald-Summation große Popularität bei der Behandlung von elektrostatischen Problemen unter periodischen Randbedingungen gewonnen. Formell gesehen beinhaltet sie zwei unendliche Summen, wobei in der einen Summe die Nahfeld- und in der anderen die Fernfeld-Wechselwirkungen ermittelt werden. Die Nahfeld-Berechnungen finden im Ortsraum statt, die Fernfeld-Berechnungen werden im Fourier-Raum durchgeführt. Die Konvergenz der jeweiligen Summe hängt von einem Parameter  $\xi$ ,  $1 \leq \xi \cdot L \leq 10$  ab, der für eine Aufspaltung der ursprünglichen Summe in zwei schnell konvergierende Summen sorgt. Bei großen  $\xi$ -Werten ist die Konvergenz der Nahfeld-Summe besser, bei kleinen Werten die der Fernfeld-Summe.

Da es allein rechentechnisch nicht möglich ist, unendlich viele Berechnungen durchzuführen, müssen die Summen in einer Simulation begrenzt ausgewertet werden. Dadurch entsteht ein Approximationsfehler, der von der Größe der Abschneideparameter, dem Cutoff-Radius  $R_c$  und der größten Wellenzahl  $K_{max}$ , abhängt.

In dieser Arbeit wurde dieser Fehler zuerst als eine Funktion in Abhängigkeit von den Abschneiderparametern analytisch bestimmt. Dabei wurden Nah- und Fernfeld-Summe getrennt betrachtet. Weiterhin wurden die Abschneideparameter in Abhängigkeit von der vorgegebenen Fehlerschranke untersucht und in Zusammenhang mit dem  $\xi$ -Wert gebracht. Außerdem wurde die Laufzeit der einzelnen Summen über die Anzahl der Rechenoperationen abgeschätzt und in Abhängigkeit von  $\xi$  für unterschiedliche Fehlerschranken und Systemgrößen analysiert. Für mögliche Anwendungen wurde die Ewald-Summation des Rotne-Prager-Tensors in C implementiert und in eine Brownian-Dynamics-Simulation eingebunden, um das hergeleitete Fehlerverhalten zu verifizieren und die Schlussfolgerungen für die Laufzeit zu überprüfen.

Die Analyse der Abhängigkeit zwischen den Abschneideparameter und einer vorgegebenen Fehlerschranke hat ergeben, dass der in der Praxis für den Nahfeld-Bereich erwünschte Cutoff-Radius von weniger als der halben Boxlänge nur für vergleichsweise große  $\xi$ -Werte zu erreichen ist. Bei diesen Werten verlangsamt sich aber die Konvergenz des Fernfeld-Anteils sehr stark, und außerdem sind nur relativ große Fehlerschranken möglich. Um eine bessere Approximation zu erhalten, muss ein größerer Bereich für explizite Berechnungen der Wechselwirkungen betrachtet werden. Dieses Ergebnis wurde

auch bei der Verifizierung der Fehlerabschätzung in der Simulation bestätigt, in der mit steigendem  $\zeta$  die Abweichung vom Referenzwert größer wurde.

Die Untersuchung der Laufzeit führte zum Ergebnis, dass die Erhöhung des Vergleichsaufwandes durch die bei steigendem Cutoff-Radius stark wachsende Zahl zu betrachtender Bildboxen im Verhältnis zum Gesamtaufwand der Berechnungen vernachlässigbar ist. Dafür werden aber die Berechnungen des Fernfeldes mit steigendem  $\zeta$  so rechenintensiv, dass die Laufzeit für ca.  $\zeta = 2.4$  am kürzesten ist. Die Benutzung dieses Wertes ist insgesamt also nicht nur im Hinblick auf die Programmlaufzeit, sondern auch auf das Fehlerverhalten günstig.

Die theoretischen Überlegungen haben sich sowohl für die Fehler- als auch für die Laufzeitabschätzung bestätigt. Die hier hergeleitete Fehlerabschätzung zeigt ein robustes Verhalten und stellt eine zuverlässige Fehlerschranke auch in einer über mehrere Tausende Zeitschritte laufenden Simulation dar. Das Laufzeitverhalten entsprach ebenso den theoretischen Erwartungen.

Als mögliche Anwendung des Rotne-Prager Tensors in periodischen Randbedingungen unter Berücksichtigung der Ewald-Summation wurde die Methode der Brownschen Dynamik vorgestellt. Intrinsisch ist der vorgestellte Algorithmus dabei sehr kostenintensiv, da zum einen die Tensor-Elemente einzeln berücksichtigt werden müssen, zum anderen aber auch korrelierte Zufallszahlen berechnet werden müssen.

Der erste Punkt stellt eine längere Laufzeit im Vergleich zu einer Methode dar, bei der *nur* die Gesamtwirkung aller Teilchen auf jeweils ein betrachtetes Teilchen benötigt wird, wie es z.B. bei der Bestimmung des Potentials und der Kraft im Falle elektrostatischer Probleme in der Molekulardynamik in periodischen Systemen unter Zuhilfenahme der Ewald-Summation der Fall ist. In einem solchen Fall können nämlich die Additionstheoreme für cos- und sin-Funktionen benutzt werden, wodurch in der reziproken Summe die Bestimmung der relativen Abstände nicht benötigt wird. Ebenso könnte die reziproke Summe durch eine schnelle Fourier-Transformation ausgewertet werden, was das Problem auf eine Komplexität von  $O(N \log N)$  reduzieren würde.

Der zweite Punkt, der sich auf die Bestimmung korrelierter Zufallszahlen bezieht, ist vom Rechenaufwand sogar noch kritischer, da das Verfahren der Cholesky-Zerlegung, das hierfür angewendet wird, mit  $O(N^3)$  skaliert. Eine Verbesserung dieses Teils hätte den Rahmen der vorliegenden Arbeit allerdings gesprengt und gibt sicherlich Anlass für weitere Untersuchungen. Als Anregung kann nur festgestellt werden, dass evtl. Approximationen durchgeführt werden können, die die Bestimmung korrelierter Zufallszahlen auf ein Verfahren nahe  $O(N)$  reduziert. Die drastischste Approximation hierbei ist sicherlich die Reduktion des Rotne-Prager Tensors auf seine Diagonalterme, was allerdings den Einfluss der anderen Teilchen und somit die Berücksichtigung hydrodynamischer Wechselwirkungen ausschließt. Allerdings könnte in einer realistischeren Approximation ein Threshold eingeführt werden, unterhalb dessen die Tensor-Elemente auf Null gesetzt werden (große Terme - große Wirkung). Ob diese Annahme einer hydrostatischen Abschirmung entspricht und ob der resultierende Tensor positiv definit formuliert werden kann, bleibt ebenso zukünftigen Untersuchungen überlassen.

Interessant ist weiterhin sicherlich den Einfluss der einzelnen Terme in der Ewald-Summation auf physikalische Größen zu untersuchen, d.h. wie spiegelt sich die Langreichweitigkeit der Wechselwirkungen in physikalischen Kenngrößen wider? Hier bieten sich zunächst zwei charakteristische Zielgrößen an. Zum einen wird die Struktur des Systems in der radialen Verteilungsfunktion wiedergegeben. Zum anderen ist der Diffusionskoeffizient ein Maß für die Dynamik und somit für zeitliche Prozesse im System. Wie diese

Größen durch Variation der Approximationen, bzw. durch unterschiedlich eingestellte Fehlertoleranzen beeinflusst werden, bleibt zu untersuchen.

Um die Methode performant auch für große Systeme bereit zu stellen, würde es sich anbieten, das Verfahren zu parallelisieren. Dies wäre zum einen für die Laufzeit interessant, zum anderen aber auch für die Verfügbarkeit von größerem Speicher. Dieser ist für die Aufstellung des dicht besetzten Rotne-Prager Tensors momentan ein kritischer Punkt (ein System mit  $N$  Teilchen benötigt eine Matrix  $T \in R^{3N \times 3N}$ , d.h. 1000 Teilchen benötigen 72 MBytes, 10000 Teilchen bereits 7,2 GB!). Aufgrund der vorher aufgeführten Punkte, ist eine hochskalierende Parallelisierung aber vermutlich nicht ohne weiteres durchzuführen. Eine Möglichkeit wäre, evtl. über eine Kraft-Zerlegung zu verfahren. Hierbei ist aber sicherlich der Druck der Anwender entscheidend, mit wieviel Aufwand eine weitere Entwicklung in dieser Richtung vorangetrieben werden soll.

Abschließend kann gesagt werden, dass mit der vorliegenden Arbeit eine Referenz geschaffen wurde, mit der hydrodynamische Rechnungen auf dem Rotne-Prager Level bei vorgegebener Fehlerschranke mit einem Satz optimaler Parameter durchgeführt werden können, die eine optimale Laufzeit und eine verlässliche Fehlerschranke garantiert.

---





# Literaturverzeichnis

- [1] ABDULNOUR Y. TOUKMAJI, JOHN A. BOARD, JR.: *Ewald summation techniques in perspective: a survey*, 1995.
- [2] ABRAMOWITZ, M. und I. A. (EDS.) STEGUN: *Repeated Integrals of the Error Function.*, 1972.
- [3] BEENAKKER, C.W.J.: *Ewald sum of the Rotne-Prager tensor*, 1986.
- [4] ERMAK, DONALD L.: *Brownian dynamics with hydrodynamic interactions*, 1978.
- [5] E.TRUCKENBRODT: *Fluidmechanik, Band 1*, 1996.
- [6] JENS ROTNE, STEPHEN PRAGER: *Variational treatment of hydrodynamic. interaction on polymers*, 1969.
- [7] K. ERIKSSON, D. ESTEP, C. JOHNSON: *Angewandte Mathematik: Body and Soul*, 2005.
- [8] MATHWORLD: *Erfc*. <http://mathworld.wolfram.com/Erfc.html>, 2009.
- [9] MAZO, ROBERT M.: *Brownian Motion. Fluctuations, Dynamics, and Applications*, 2002.
- [10] MOSHIER, STEPHEN L.: *Cephes Math Library Release 2.8*. <http://www.moshier.net/#Cephes>, June 2000.
- [11] SATOH, A.: *Introduction to Molecular-microsimulation of Colloidal Dispersions*, 2003.
- [12] SCHADE, KUNZ: *Strömungslehre*, 1999.
- [13] SUTMANN, GODEHARD: *Molecular Dynamics Simulations*. <http://www.fz-juelich.de/jsc/JSCPeople/sutmann-teaching>, 2008.
- [14] SUTMANN, GODEHARD: *Molecular Dynamics - Vision and Reality*. In: *Computational Nanoscience: Do It Yourself!; Lecture Notes*, Seiten 159–194, Jülich, Germany, February 14-21, 2006.
- [15] TAEK-JUN KWON, JEFF SONDEEN, JEFF DRAPER: *Floating-Point Division and Square Root using a Taylor-Series Expansion Algorithm*. In: *Proceedings of the IEEE International Conference on Electronics, Circuits and Systems*, Seiten 702–705, September 2008.
- [16] WIEGHARDT, KARL: *Theoretische Strömungslehre*, 2006.
- [17] WIKIPEDIA: *Madelung-Konstante*. <http://de.wikipedia.org/wiki/Madelung-Konstante>, 2009.



Jül-4306  
August 2009  
ISSN 0944-2952